



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

METODY NUMERICKÉHO INTEGROVÁNÍ

METHODS OF NUMERICAL INTEGRATION

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Filip Čoupek

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Mgr. Jitka Zatočilová, Ph.D.

BRNO 2018

Zadání bakalářské práce

Ústav: Ústav matematiky
Student: **Filip Čoupek**
Studijní program: Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: Matematické inženýrství
Vedoucí práce: **Mgr. Jitka Zatočilová, Ph.D.**
Akademický rok: 2017/18

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Metody numerického integrování

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Existuje několik důvodů proč je nutné provádět výpočet některých integrálů numericky: např. když integrál nelze spočítat analyticky, když je integrand $f(x)$ znám pouze v určitých bodech a nebo když je analytický výpočet daného integrálu příliš náročný.

V průběhu posledního století bylo odvozeno mnoho metod pro numerický výpočet jak jednoduchého (určitého i neurčitého) integrálu, tak i pro výpočet vícerozměrných integrálů.

Cíle bakalářské práce:

Cílem práce je uvedení kvadraturních formulí a metod pro výpočet jednoduchého určitého integrálu, včetně jejich důležitých vlastností a následná aplikace těchto metod na vhodných příkladech s využitím softwaru MATLAB.

Seznam doporučené literatury:

ČERMÁK, L. a R. HLAVIČKA. Numerické metody. 2. vyd. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2008. ISBN 978-80-214-3752-4.

DAVIS, P. J. a P. RABINOWITZ. Methods of numerical integration. 2.vyd. New York: Academic Press, 1984. ISBN 978-1483237961.

MOLER, C. B. Numerical computing with MATLAB. Philadelphia: SIAM, 2004. ISBN 978-0898715606.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2017/18

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

Abstrakt

Tato bakalářská práce je zaměřena na numerický výpočet jednoduchého určitého integrálu. Nejprve jsou zavedeny základní pojmy a stručně popsány interpolační a ortogonální polynomy, ze kterých pak vychází jednotlivé formule. Důraz je kladen na představení, odvození a popis Newton-Cotesových kvadraturních formulí, Gausových kvadraturních formulí a Clenshaw-Curtisových kvadraturních formulí. V předposlední kapitole popíšeme princip metody adaptivní integrace a Rombergovy metody. V závěru práce je srovnání jednotlivých metod na konkrétních příkladech pomocí softwaru Matlab.

Summary

This bachelor thesis focuses on numerical calculation of a simple specific integral. First, the basic concepts are established and briefly described interpolation and orthogonal polynomials, from which the individual formulas are based. Emphasis is placed on the introduction, derivation and description of Newton-Cotes quadrature formulas, Gauss quadrature formulas and Clenshaw-Curtis quadrature formulas. In the penultimate chapter we describe the principle of adaptive integration and Romberg's method. At the end of the thesis is a comparison of individual methods on specific examples using the software Matlab.

Klíčová slova

Numerická integrace, interpolační polynomy, ortogonální polynomy, Newton-Cotesovy vzorce, Gaussova kvadratura, Clenshaw-Curtisova kvadratura, metoda adaptivní integrace, Rombergova metoda

Keywords

Numerical integration, polynomial interpolation, orthogonal polynomials, Newton-Cotes formulas, Gaussian quadrature, Clenshaw-Curtis quadrature, adaptive integration, Romberg's method

ČOUPEK, F. *Metody numerického integrování*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2018. 58 s. Vedoucí bakalářské práce Mgr. Jitka Zatočilová, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci *Numerické metody integrování* vypracoval samostatně pod vedením Mgr. Jitky Zatočilové, Ph.D. s použitím materiálů uvedených v seznamu literatury.

Filip Čoupek

Děkuji vedoucí práce Mgr. Jitce Zatočilové, Ph.D. za velmi vstřícný přístup a užitečné rady při vedení mé práce.

Filip Čoupek

Obsah

Úvod	12
1 Numerický výpočet integrálů	13
1.1 Základní pojmy	13
1.2 Interpolační a ortogonální polynomy	14
2 Newton-Cotesovy formule	18
2.1 Uzavřené Newton-Cotesovy formule	18
2.2 Otevřené Newton-Cotesovy formule	22
2.3 Složené formule	24
2.4 Konvergence	28
3 Gaussovy kvadraturní formule	29
3.1 Gaussova-Legendreova kvadraturní formule	31
3.2 Gaussova-Čebyševova kvadraturní formule	34
3.3 Radauova a Lobattova kvadraturní formule	37
4 Clenshaw-Curtisovy formule	41
5 Další metody	46
5.1 Adaptivní integrace	46
5.2 Rombergova metoda	47
6 Srovnání kvadraturních formulí	50
Závěr	56
Reference	57

Úvod

Tato bakalářská práce se věnuje numerickému integrování, které se používá k přibližnému výpočtu určitých integrálů. Pojem numerické integrování se poprvé objevil v roce 1915 v publikaci od Davida Gibba. V minulosti se pro výpočet plochy začal používat pojem kvadratura, kterým podle Pythagorovy doktríny bylo rozuměno počítání obsahu jako konstruování čtverce o stejné ploše. Už staří Babyloňané počítali lichoběžníkovým pravidlem pohyb Jupiteru po eliptické křivce. S příchodem Riemannova integrálu přišla univerzální metoda pro výpočet plochy. Pojem kvadratura se již ale zachoval.

Existuje několik důvodů, proč je nutné provádět výpočet některých integrálů numericky: např. když integrál nelze spočítat analyticky (např. $\int_a^b e^{-x^2} dx$), když je integrand $f(x)$ znám pouze v určitých bodech a nebo když je analytický výpočet daného integrálu příliš náročný. Při aproximaci určitého integrálu se používají kvadraturní formule. Základem každé kvadraturní formule jsou její koeficienty a uzly.

Práce je členěna následujícím způsobem. Na začátku první kapitoly nejprve zavádíme základní pojmy, se kterými se budeme setkávat v průběhu celé práce, a následně zde uvádíme i některé interpolační polynomy, které se budou používat při odvození jednotlivých kvadraturních formulí.

Ve druhé kapitole jsou popsány Newton-Cotesovy kvadraturní formule a jsou zde uvedeny nejznámější z těchto kvadraturních formulí jak uzavřených tak i otevřených typů. Závěr této druhé kapitoly je zaměřen na složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule.

Třetí kapitola se zabývá kvadraturními formulami Gaussova typu, konkrétně pak Gauss-Legendreovými kvadraturními formulami, Gauss-Čebyševovými kvadraturními formulami, ale i Raduaovými a Lobattovými kvadraturními formulami, ve kterých jsou některé uzlové body předem předepsány.

Čtvrtá kapitola popisuje méně známé Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule a v předposlední páté kapitole stručně popisujeme princip metody adaptivní integrace a Rombergovy metody. U všech uvedených metod numerického integrování se budeme zabývat jejich vlastnostmi, jako jsou přesnost, stabilita a velikost chyby, které se dopustíme, nahradíme-li přesnou hodnotu integrálu jeho aproximací.

Náplní poslední kapitoly je otestování a srovnání jednotlivých metod na konkrétních příkladech s použitím výpočetního softwaru Matlab.

1. Numerický výpočet integrálů

1.1. Základní pojmy

Nechť $f(x)$ je reálná integrovatelná funkce na intervalu $\langle a; b \rangle$. Pro přesnou hodnotu určitého integrálu funkce $f(x)$ na intervalu $\langle a; b \rangle$ budeme používat označení

$$I(f) := \int_a^b f(x) dx.$$

Přibližnou hodnotu integrálu budeme značit $Q(f) := I(\varphi(x))$, kde $\varphi(x)$ je vhodná aproximace funkce $f(x)$.

Funkci $Q(f)$ nazýváme **kvadrurní formulí**. Obecně lze tuto kvadrurní formuli zapsat ve tvaru

$$Q(f) := \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (1.1)$$

kde čísla w_i jsou **koeficienty** a body $x_i \in \langle a; b \rangle$ jsou **uzly** kvadrurní formule. Volbou koeficientů a uzlů je pak určena konkrétní kvadrurní formule.

Chyby, které se dopustíme, když místo přesného integrálu $I(f)$ použijeme kvadrurní formuli $Q(f)$ nazýváme **diskretizační chybou** nebo také **chybou kvadrurní formule** a budeme ji značit

$$R(f) := I(f) - Q(f). \quad (1.2)$$

Daný tvar chyby budeme uvádět u každé kvadrurní formule.

Dalším důležitým pojmem je **algebraický řád** (nebo také stupeň přesnosti) kvadrurní formule $Q(f)$. Ten lze vyjádřit celým nezáporným číslem r , jestliže platí $R(x^j) = 0$ pro $j = 0, 1, \dots, r$ a $R(x^{r+1}) \neq 0$. Formule je tedy řádu r , pokud integruje přesně polynomy stupně r , ale polynomy stupně $r + 1$ už přesně neintegruje.

Nyní si uvedeme dvě důležité věty o algebraickém řádu kvadrurní formule.

Věta 1.1.1 *Kvadrurní formule užívající $n + 1$ uzlů má stupeň přesnosti nejvýše $2n + 1$.*

Věta 1.1.2 *Kvadrurní formule získaná integrací interpolačního polynomu určeného body $[x_i, f(x_i)]$, $i = 0, \dots, n$, má stupeň přesnosti alespoň n .*

Důkaz vět např. v [7].

V závěru této podkapitoly ještě uvedeme větu o přesnosti aproximace.

Věta 1.1.3 *Nechť $Q_r(f) := \sum_{i=0}^{n_r} w_i^r f(x_i^r)$, $r = 0, 1, \dots$, je kvadrurní formule s kladnými koeficienty řádu r . Pak pro každou funkci $f(x)$ spojitou na intervalu $\langle a; b \rangle$ platí*

$$\lim_{r \rightarrow \infty} Q_r(f) = I(f).$$

Důkaz věty lze nalézt např. v [1].

1.2. INTERPOLAČNÍ A ORTOGONÁLNÍ POLYNOMY

Z této věty vyplývá, že pokud potřebujeme spočítat integrál $I(f)$ s požadovanou přesností $\varepsilon > 0$, tedy tak, aby platilo $|I(f) - Q(f)| < \varepsilon$, tak stačí použít interpolační kvadraturní formuli dostatečně vysokého řádu.

1.2. Interpolační a ortogonální polynomy

Při odvozování jednotlivých kvadraturních formulí budeme v dalších kapitolách používat některé interpolační polynomy, a proto si je zde stručně uvedeme.

1. Lagrangeův interpolační polynom je polynom n -tého stupně, jenž prochází $n + 1$ uzlovými body se souřadnicemi $[x_0, f_0], [x_1, f_1], \dots, [x_n, f_n]$, kde $f_i = f(x_i)$ pro $i = 0, 1, \dots, n$ a hodnoty x_0, x_1, \dots, x_n jsou navzájem různá čísla. Polynom zapisujeme ve tvaru

$$P_n(x) = f_0\varphi_0(x) + f_1\varphi_1(x) + \dots + f_n\varphi_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i\varphi_i(x), \quad (1.3)$$

kde

$$\varphi_i(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\pi_{n+1}(x)}{(x - x_i)\pi'_{n+1}(x_i)}, \quad (1.4)$$

pro $i = 0, 1, \dots, n$, a kde $\pi_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$.

Rovnost $P_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$ je splněna, jelikož platí

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{pro } i = j \\ 0 & \text{pro } i \neq j. \end{cases}$$

Polynomům φ_i , $i = 0, 1, \dots, n$ se říká **Lagrangeovy báze** interpolačního polynomu.

Při nahrazení funkce interpolačním polynomem se dopouštíme jisté chyby. Tuto chybu nazveme **interpolační chybou** a zapisujeme ji ve tvaru $f(x) - P_n(x)$. Je zřejmé, že v uzlech x_i bude interpolační chyba nulová, ale mimo uzly může být velká.

Jaké chyby se dopustíme při aproximaci funkce $f(x)$ interpolačním polynomem udává následující věta.

Věta 1.2.1 *Nechť uzly x_i , $i = 0, 1, \dots, n$ jsou vzájemně různé a leží na intervalu $\langle a; b \rangle$. Nechť funkce $f(x)$ má na tomto intervalu $n + 1$ spojitých derivací. Pak pro každé $x \in \langle a; b \rangle$ existuje $\xi = \xi(x)$ v $(a; b)$ tak, že platí*

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \pi_{n+1}(x), \quad (1.5)$$

kde $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n)$.

Důkaz věty viz [11].

2. Hermitův interpolační polynom je opět polynom, jenž prochází $n + 1$ uzlovými body se souřadnicemi $[x_0, f_0], [x_1, f_1], \dots, [x_n, f_n]$, kde $f_i = f(x_i)$ pro $i = 0, 1, \dots, n$ a hodnoty x_0, x_1, \dots, x_n jsou navzájem různá čísla. Na rozdíl od Lagrangeova polynomu

jsou zde také požadavky na hodnoty derivací různých stupňů ve vybraných uzlech. Pro práci s kvadraturními formulami nám však bude stačit, když v každém uzlu budeme znát funkční hodnotu a hodnotu první derivace. Pro takto zadané parametry bude Hermitův interpolační polynom stupně nejvýše $2n + 1$ a bude pro něj platit

$$\begin{aligned} P_{2n+1}(x_i) &= f_i, & i &= 0, 1, \dots, n \\ P'_{2n+1}(x_i) &= f'_i, & i &= 0, 1, \dots, n \end{aligned} \quad (1.6)$$

Polynom P_{2n+1} budeme hledat ve tvaru

$$P_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n f_i s_i(x) + \sum_{i=0}^n f'_i t_i(x), \quad (1.7)$$

kde hodnoty f_i a f'_i jsou dány a s_i a t_i jsou polynomy stupně $2n + 1$, které musí splňovat podmínky (1.6), tedy

$$\begin{aligned} s_i(x_j) &= \delta_{ij}, & i, j &= 0, 1, \dots, n \\ t_i(x_j) &= 0, & i, j &= 0, 1, \dots, n \\ s'_i(x_j) &= 0, & i, j &= 0, 1, \dots, n \\ t'_i(x_j) &= \delta_{ij}, & i, j &= 0, 1, \dots, n, \end{aligned}$$

kde $\delta_{ij} = 0$ pro $i \neq j$ a $\delta_{ij} = 1$ pro $i = j$ je Kroneckerův symbol.

Tyto podmínky splňují polynomy

$$s_i(x_j) = [1 - 2(x - x_i)\varphi'_i(x_i)]\varphi_i^2(x), \quad (1.8)$$

$$t_i(x_j) = (x - x_i)\varphi_i^2(x), \quad (1.9)$$

kde $\varphi_i, i = 0, 1, \dots, n$ jsou Lagrangeovy báze (1.4).

Následující věta popisuje interpolační chybu pro Hermitův interpolační polynom.

Věta 1.2.2 *Nechť uzly $x_i, i = 0, 1, \dots, n$, jsou vzájemně různé a leží na intervalu $\langle a; b \rangle$. Nechť funkce f má na tomto intervalu $n + 1$ spojitých derivací. Pak pro každé $x \in \langle a; b \rangle$ existuje $\xi = \xi(x)$ v $(a; b)$ tak, že platí*

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi_{n+1}(x), \quad (1.10)$$

kde $\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)^2 \dots (x - x_n)^2$.

Důkaz věty v [7].

3. Ortogonální polynomy se využívají při konstrukci Gaussových kvadraturních formulí. Nechť w je integrovatelná a nezáporná funkce na intervalu $\langle a; b \rangle$ a $w(x) > 0$ skoro všude na $\langle a; b \rangle$. Tuto funkci nazveme **váhovou funkcí**. Dále definujeme skalární součin

$$\langle u, v \rangle = \int_a^b u(x)v(x)w(x) dx, \quad (1.11)$$

1.2. INTERPOLAČNÍ A ORTOGONÁLNÍ POLYNOMY

pro všechny funkce, pro které existuje konečný integrál

$$\langle u, u \rangle = \int_a^b w(x) u^2(x) dx < \infty.$$

Jestliže $\langle u, v \rangle = 0$ pro $u \neq v$ nebo $\langle u, v \rangle > 0$ pro $u = v$, pak funkce u, v jsou ortogonální na intervalu $\langle a; b \rangle$ s váhovou funkcí w .

Mezi takovéto ortogonální polynomy patří třeba:

• **Legendreovy polynomy** L_n , což jsou polynomy ortogonální na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ s váhovou funkcí $w(x) = 1$, které mají tvar

$$\begin{aligned} L_0(x) &= 1, \\ L_1(x) &= x, \\ L_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ L_3(x) &= \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, \\ &\dots \end{aligned}$$

Obecně je lze zapsat rekurentním předpisem pro $n = 1, 2, \dots$ takto

$$L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xL_n(x) - \frac{n}{n+1}L_{n-1}(x); \quad L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x. \quad (1.12)$$

Pro ortogonalitu platí

$$\int_{-1}^1 L_n(x)L_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m, \\ \frac{2}{2n+1} & \text{pro } n = m. \end{cases} \quad (1.13)$$

• **Čebyševovy polynomy 1. typu** T_n jsou polynomy s váhovou funkcí $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ ortogonální na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu v (1.11). Čebyševovy polynomy zapisujeme ve tvaru $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$. Takto získané polynomy mají tvar

$$\begin{aligned} T_0(x) &= \cos(0 \arccos(x)) = 1, \\ T_1(x) &= \cos(1 \arccos(x)) = x, \\ T_2(x) &= \cos(2 \arccos(x)) = 2(\cos(\arccos(x)))^2 - 1 = 2x^2 - 1, \\ &\text{protože } \cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x = \cos^2 x - (1 - \cos^2 x) = 2\cos^2 x - 1, \\ &\dots \end{aligned}$$

Obecně je můžeme zapsat v rekurentním tvaru

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x); \quad T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad \text{pro } n = 1, 2, \dots \quad (1.14)$$

Pro ortogonalitu platí

$$\int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m, \\ \pi & \text{pro } n = m = 0, \\ \frac{\pi}{2} & \text{pro } n = m \neq 0. \end{cases} \quad (1.15)$$

Ještě poznamenejme, že výše uvedené rekurentní vyjádření Čebyševova polynomu lze odvodit i z trigonometrického vztahu

$$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2},$$

kde $\alpha = \cos((n+1) \arccos x)$ a $\beta = \cos((n-1) \arccos x)$.

• **Čebyševovy polynomy 2. typu** U_n jsou polynomy s váhovou funkcí $w(x) = \sqrt{1-x^2}$ ortogonální na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ vzhledem k výše uvedenému skalárnímu součinu v (1.11).

Pro výpočet těchto polynomů platí rekurentní vztah

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x); \quad U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x, \quad \text{pro } n = 1, 2, \dots \quad (1.16)$$

Pro skalární součin u těchto polynomů platí

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n(x) U_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } n \neq m, \\ \frac{\pi}{2} & \text{pro } n = m. \end{cases}$$

Mezi další ortogonální polynomy patří např. Laguerrovy, Hermitovy, atd., ty už zde ale neuvádíme, jelikož je v dalším textu nebudeme užívat.

Pokud bychom chtěli počítat i na jiných intervalech, než je $\langle -1; 1 \rangle$, pak mezi polynomy $P_n^{(-1;1)}$ a $P_n^{(a;b)}$ existuje následující transformační vztah

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t, \quad t \in \langle -1; 1 \rangle \quad (1.17)$$

a tedy $P_n^{(a;b)}(x) = P_n^{(-1;1)}\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right), t \in \langle -1; 1 \rangle$.

Na závěr tohoto odstavce o ortogonálních polynomech ještě uvedeme důležitou větu o kořenech těchto polynomů.

Věta 1.2.3 *Nechť P_j je systém polynomů ortogonálních s váhou w na intervalu $\langle a; b \rangle$. Platí: Každý polynom P_j má všechny kořeny reálné, různé a všechny leží v intervalu (a, b) .*

Důkaz věty lze nalézt např. v [7].

2. Newton-Cotesovy formule

Newton-Cotesovy formule patří asi mezi nejznámější kvadraturní formule pro numerický výpočet integrálů. Funkci $f(x)$ v integrálu $I(f)$ aproximujeme vhodným Lagrangeovým interpolačním polynomem požadovaného stupně. Aproximaci tedy hledáme ve tvaru:

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_n(x) dx \quad (2.1)$$

U Newton-Cotesových formulí se předpokládá, že uzly na intervalu $\langle a; b \rangle$ jsou ekvidistantní, a že platí $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, přičemž

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n-1,$$

kde $h = (b - a)/n$.

Z předešlé kapitoly víme, že polynom v (2.1) bude tvaru

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \varphi_i(x), \quad \text{kde } \varphi_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (2.2)$$

Dosazením (2.2) do (2.1) dostaneme obecnou **Newton-Cotesovu kvadraturní formuli**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) = Q(f) \quad (2.3)$$

kde

$$w_i = \int_a^b \varphi_i(x) dx, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (2.4)$$

jsou **integrační koeficienty**.

Newton-Cotesovy formule dělíme na dva základní typy - na formule uzavřené a formule otevřené.

Uzavřené Newton-Cotesovy formule jsou takové, ve kterých koncové body intervalu $\langle a; b \rangle$ jsou zároveň i uzly a tedy pro $n \geq 1$ je $h = \frac{b-a}{n}$, $x_0 = a$ a $x_n = b$.

Otevřené Newton-Cotesovy formule jsou takové, ve kterých koncové body intervalu $\langle a; b \rangle$ nejsou uzlovými body, stačí u nich znát funkční hodnotu nějakého vnitřního bodu intervalu a tedy pro $n \geq 0$ je $h = \frac{b-a}{n+2}$, $x_0 = a + h$ a $x_n = b - h$.

2.1. Uzavřené Newton-Cotesovy formule

Nejzákladnější uzavřenou Newton-Cotesovou formuli dostaneme pro $n = 1$, a tedy pro $h = b - a$, $x_0 = a$ a $x_1 = b$.

Lagrangeův interpolační polynom procházející uzly $x_0 = a$ a $x_1 = b$ má tvar

$$P_1(x) = \varphi_0 f(a) + \varphi_1 f(b).$$

Integrační koeficienty w_0 a w_1 mají tedy dle (2.4) tvar

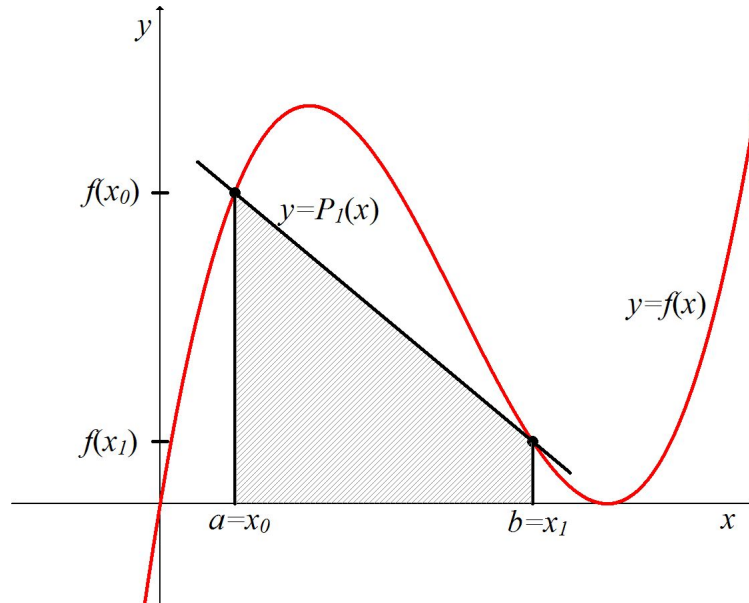
$$w_0 = \int_a^b \varphi_0(x) dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b} dx = \frac{\left[\frac{x^2}{2} - bx\right]_a^b}{a-b} = \frac{-b^2 + 2ab - a^2}{2(a-b)} = -\frac{1}{2} \frac{(a-b)^2}{(a-b)} = \frac{b-a}{2},$$

$$w_1 = \int_a^b \varphi_1(x) dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a} dx = \frac{\left[\frac{x^2}{2} - ax\right]_a^b}{b-a} = \frac{b^2 - 2ab + a^2}{2(b-a)} = -\frac{1}{2} \frac{(a-b)^2}{(a-b)} = \frac{b-a}{2}.$$

Jejich dosazením do (2.3) dostáváme

$$I(f) \approx \frac{1}{2}h[f(a) + f(b)] = Q_{Lich}, \quad (2.5)$$

což je obsah lichoběžníku, a proto se tato formule nazývá **lichoběžníková** (viz obrázek 2.1).



Obrázek 2.1: Princip lichoběžníkové formule

Integrací vzorce (1.5) pro chybu interpolace $f(x) - P_1(x)$ dostaneme

$$\begin{aligned} R_{Lich}(f) &= \frac{1}{2} \int_a^b (x-a)(x-b)f''(\xi) dx = \\ &= \frac{1}{2} \int_a^b (x^2 - xb - ax + ab)f''(\xi) dx = \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{x^3}{3} - \frac{bx^2}{2} - \frac{ax^2}{2} + abx \right]_a^b f''(\xi) = \\ &= \frac{1}{12}(-b^3 + 3ab^2 + a^3 - 3a^2b)f''(\xi) = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi) = \\ &= -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle. \end{aligned}$$

Následující věta vyjadřuje chybu pro libovolnou Newton-Cotesovu kvadraturní formuli.

2.1. UZAVŘENÉ NEWTON-COTESOVY FORMULE

Věta 2.1.1 Pro libovolnou Newton-Cotesovu kvadraturní formuli odpovídající sudému n lze chybu vyjádřit jako

$$R_n(f) = \frac{M_n}{(n+2)!} h^{n+3} f^{n+2}(\xi),$$

pokud $f \in C^{n+2}\langle a; b \rangle$, kde $\xi \in \langle a; b \rangle$ a

$$M_n = \begin{cases} \int_0^n t \cdot \pi_{n+1}(t) dt < 0 & \text{pro uzavřené formule,} \\ \int_{-1}^{n+1} t \cdot \pi_{n+1}(t) dt > 0 & \text{pro otevřené formule,} \end{cases}$$

kde $\pi_{n+1}(t) = \prod_{i=0}^t (t - i)$. Z toho také plyne, že algebraický řád formule je $n + 1$. Podobně pro liché n je chyba formule dána vztahem

$$R_n(f) = \frac{K_n}{(n+1)!} h^{n+2} f^{n+1}(\xi),$$

pokud $f \in C^{n+1}\langle a; b \rangle$, kde $\xi \in \langle a; b \rangle$ a

$$K_n = \begin{cases} \int_0^n \pi_{n+1}(t) dt < 0 & \text{pro uzavřené formule,} \\ \int_{-1}^{n+1} \pi_{n+1}(t) dt > 0 & \text{pro otevřené formule,} \end{cases}$$

z čehož vyplývá, že algebraický řád formule je n .

Pro důkaz věty viz [17].

Pro $n = 2$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{2}$, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ a $x_2 = b$ dostáváme druhou uzavřenou Newton-Cotesovu formuli, která je známá jako **Simpsonova kvadraturní formule** (viz obrázek 2.2).

Langrageův interpolační polynom druhého stupně má tvar

$$P_2(x) = \varphi_0 f(a) + \varphi_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \varphi_2 f(b),$$

kde

$$\varphi_0 = \frac{(x - \frac{a+b}{2})(x - b)}{(a - \frac{a+b}{2})(a - b)}, \quad \varphi_1 = \frac{(x - a)(x - b)}{(\frac{a+b}{2} - a)(\frac{a+b}{2} - b)}, \quad \varphi_2 = \frac{(x - a)(x - (\frac{a+b}{2}))}{(b - a)(b - \frac{a+b}{2})}$$

a jejich integrací dostaneme příslušné koeficienty

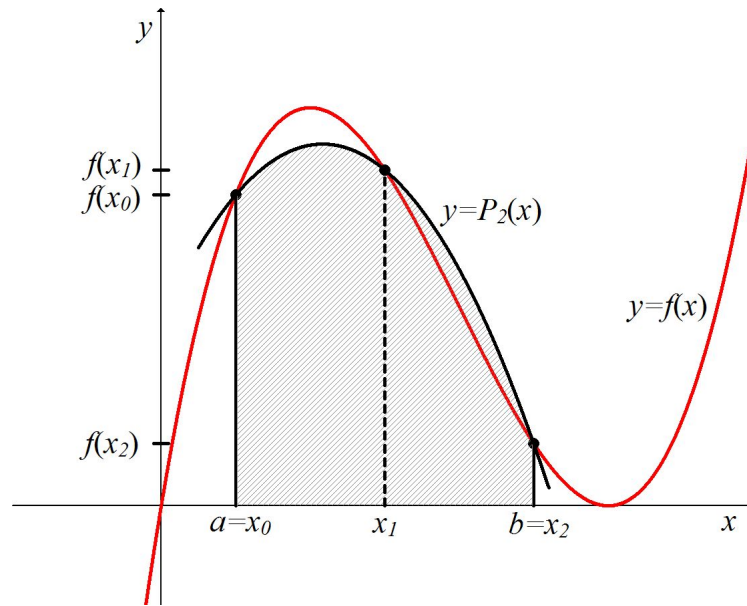
$$\begin{aligned} w_0 &= \int_a^b \varphi_0(x) dx = \int_a^b \frac{(x - \frac{a+b}{2})(x - b)}{(a - \frac{a+b}{2})(a - b)} dx = \\ &= \frac{1}{(a - b)^2} \int_a^b ab - ax + b^2 - 3bx + 2ax^2 dx = \\ &= \frac{1}{(a - b)^2} \left[abx - \frac{ax^2}{2} - \frac{3bx^2}{2} + \frac{2ax^3}{3} \right]_a^b = \\ &= -\frac{1}{6(a - b)^2} (a^3 - 3a^2b + 3ab^2 - b^3) = -\frac{(a - b)^3}{6(a - b)^2} = \\ &= \frac{b - a}{6} = \frac{1}{3}h. \end{aligned}$$

Stejným způsobem spočteme i další dva koeficienty w_1 a w_2 a dostaneme

$$w_1 = \frac{4(b-a)}{6} = \frac{4}{3}h, \quad w_2 = \frac{b-a}{6} = \frac{1}{3}h. \quad (2.6)$$

Po dosazení těchto koeficientů do (2.3) dostáváme předpis Simpsonovy kvadraturní formule

$$I(f) \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] = Q_{Simps}. \quad (2.7)$$



Obrázek 2.2: Princip Simpsonové formule

Z věty (2.1.1) plyne, že tato formule je řádu 3 a pro chybu platí

$$R_{Simps}(f) = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Další uzavřená formule je pro $n = 3$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{3}$, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{2a+b}{3}$, $x_2 = \frac{a+2b}{3}$ a $x_3 = b$ a nazývá se **Simpsonova 3/8 kvadraturní formule**.

Obdobně jako v předešlých formulích bychom pomocí Lagrangeova polynomu třetího stupně $P_3(x)$ vypočítali koeficienty a obdrželi předpis:

$$I(f) \approx \frac{3}{8}h \left[f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b) \right] = Q_{\frac{3}{8}Simps},$$

z něhož lze i vidět, proč byl pojmenován $\frac{3}{8}$ formule.

Z věty (2.1.1) plyne, že formule je řádu 3 a chybu lze vyjádřit ve tvaru

$$R_{\frac{3}{8}Simps}(f) = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

2.2. OTEVŘENÉ NEWTON-COTESOVY FORMULE

Poslední pojmenovaná uzavřená Newton-Cotesova formule je pro $n = 4$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{4}$, $x_0 = a$, $x_1 = \frac{3a+b}{4}$, $x_2 = \frac{a+b}{2}$, $x_3 = \frac{a+3b}{4}$ a $x_4 = b$, a nazývá se **Booleova kvadraturační formule**. Její předpis získáme obdobně jako u výše uvedených formulí a má tvar

$$I(f) \approx \frac{2}{45}h \left[7f(a) + 32f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 12f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 32f\left(\frac{a+3b}{4}\right) + 7f(b) \right] = Q_{Bool}. \quad (2.8)$$

Z věty (2.1.1) plyne, že formule je řádu 5 a chybu této formule vyjádříme ve tvaru

$$R_{Bool}(f) = -\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Další uzavřené kvadraturační formule již nemají svůj název. V tabulce (3.1) uvádíme integrační koeficienty až do $n = 8$. U těchto integračních koeficientů si můžeme všimnout patřičné symetrie a také toho, že pro $n = 8$ již integrační koeficienty nejsou všechny kladné.

n	w_0	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	w_6	w_7	w_8	Chyba
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0	0	0	0	$-\frac{1}{12}f''(\xi)h^3$
2	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	0	0	0	0	0	$-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi)$
3	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$	0	0	0	0	0	$-\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$	0	0	0	0	$-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\xi)$
5	$\frac{95}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{95}{288}$	0	0	0	$-\frac{275}{12096}h^7 f^{(6)}(\xi)$
6	$\frac{41}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{272}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{41}{140}$	0	0	$-\frac{9}{1400}h^9 f^{(8)}(\xi)$
7	$\frac{5257}{17280}$	$\frac{25039}{17280}$	$\frac{9261}{17280}$	$\frac{20923}{17280}$	$\frac{20923}{17280}$	$\frac{9261}{17280}$	$\frac{25039}{17280}$	$\frac{5257}{17280}$	0	$-\frac{8183}{518400}h^9 f^{(8)}(\xi)$
8	$\frac{3956}{14175}$	$\frac{23552}{14175}$	$-\frac{3712}{14175}$	$\frac{41984}{14175}$	$-\frac{18160}{14175}$	$\frac{41984}{14175}$	$-\frac{3712}{14175}$	$\frac{23552}{14175}$	$\frac{3956}{14175}$	$-\frac{2368}{467775}h^{11} f^{(10)}(\xi)$

Tabulka 2.1: Integrační koeficienty a chyby uzavřených Newton-Cotesových kvadraturačních formulí

2.2. Otevřené Newton-Cotesovy formule

Nejjednodušší otevřenou Newton-Cotesovu formuli dostaneme pro $n = 0$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{2}$, $x_0 = \frac{a+b}{2}$, což je střed intervalu $\langle a; b \rangle$. V tomto případě bude Lagrangeův interpolační polynom 0. stupně, tj. konstantní funkce

$$P_0(x) = \varphi_0 f(x_0)$$

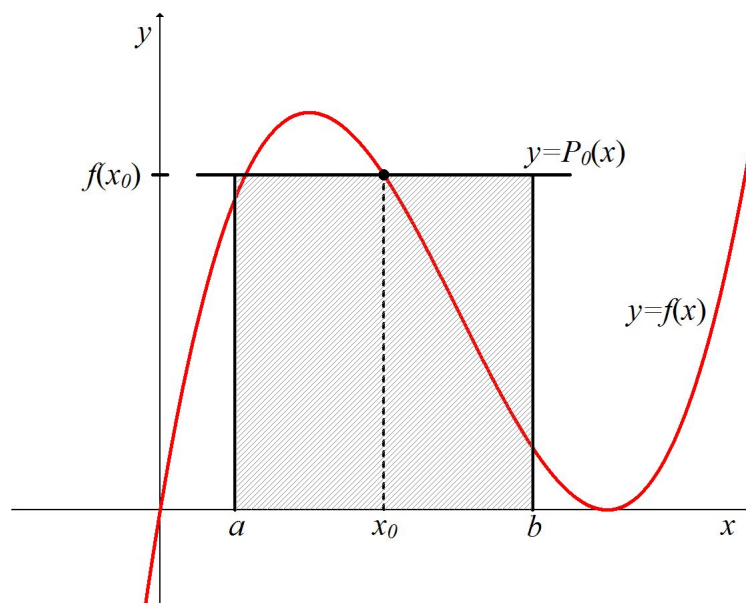
a tedy

$$w_0 = \int_a^b \varphi_0 dx = \int_a^b 1 dx = [x]_a^b = b - a.$$

Odtud už vidíme, že kvadraturační formule má předpis

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) = Q_{Obd}, \quad (2.9)$$

jelikož se jedná o obsah obdélníku (viz obrázek 2.3), dostala tato formule název **obdélníková kvadraturační formule**.



Obrázek 2.3: Princip obdélníkové formule

Z věty (2.1.1) plyne, že formule je řádu 1 a její chyba je ve tvaru

$$R_{Obd}(f) = \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Poznámka 2.2.1 Tato obdélníková formule vztažená k prostřednímu bodu intervalu je v anglické literatuře nazývána "midpoint rule". Pokud bychom nebrali funkční hodnotu ve středovém bodě intervalu $\langle a; b \rangle$, ale v jednom z krajních bodů tohoto intervalu, pak bychom dostali polouzavřenou kvadraturní formuli levého (resp. pravého) odhadu. U metody levého odhadu je uzlovým bodem $x_0 = a$ a u metody pravého odhadu je uzlovým bodem $x_0 = b$.

Formule pro metodu levého odhadu má tvar

$$I(f) \approx (b-a)f(a)$$

a formule pro metodu pravého odhadu má tvar

$$I(f) \approx (b-a)f(b).$$

Pro $n = 1$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{3}$, $x_0 = \frac{2a+b}{3}$, $x_1 = \frac{a+2b}{3}$ dostáváme otevřenou Newton-Cotesovu kvadraturní formuli, která se také nazývá **lichoběžníková metoda**. Tato metoda se oproti uzavřené lichoběžníkové formuli liší jednak uzlovými body, ale hlavně také diskretizační chybou. Její předpis získáme podobně jak u předchozích formulí z Lagrangeova interpolačního polynomu $P_1(x)$ a má tvar

$$I(f) \approx \frac{3}{2}h(f_1 + f_2) = Q_{Lich}.$$

Dle věty (2.1.1) je řádu 1 a chybu můžeme vyjádřit ve tvaru

$$R_{Lich}(f) = -\frac{1}{4}h^3 f''(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

2.3. SLOŽENÉ FORMULE

Další pojmenovaná otevřená Newton-Cotesova formule je pro $n = 2$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{4}$, $x_0 = \frac{3a+b}{4}$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = \frac{a+3b}{4}$ a nazývá se **Milneho kvadrurní formule**. Formulí dostaneme z Lagrangeova interpolačního polynomu $P_2(x)$ obdobně jako u výše uvedených formulí a má předpis

$$I(f) \approx \frac{4}{3}h(2f_1 - f_2 + 2f_3) = Q_{Mil}.$$

Z věty (2.1.1) plyne, že formule je řádu 3 a pro chybu platí

$$R_{Mil}(f) = -\frac{14}{45}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Poslední pojmenovaná otevřená Newton-Cotesova formule je pro $n = 3$, a tedy pro $h = \frac{b-a}{5}$, $x_0 = \frac{4a+b}{5}$, $x_1 = \frac{3a+2b}{5}$, $x_2 = \frac{2a+3b}{5}$, $x_3 = \frac{a+4b}{5}$ a nazývá se **Willmova kvadrurní formule**. Obdobně jako u výše uvedených formulí dostaneme předpis z Lagrangeova interpolačního polynomu $P_3(x)$ a formule je ve tvaru

$$I(f) \approx \frac{5}{24}h(11f_1 + f_2 + f_3 + 11f_4) = Q_{Will}.$$

Z věty (2.1.1) plyne, že formule je řádu 4 a pro její chybu platí

$$R_{Will}(f) = -\frac{95}{144}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Další otevřené kvadrurní formule již nemají svůj název. V tabulce (3.2) uvádíme souhrnně integrační koeficienty Newton-Cotesových kvadrurních formulí až do $n = 6$. I u těchto integračních koeficientů si můžeme všimnout patřičné symetrie, ale také záporných integračních koeficientů.

n	w_0	w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	w_6	Chyba
0	2	0	0	0	0	0	0	$-\frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\xi)$
1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	0	0	0	0	0	$-\frac{1}{4}h^3 f''(\xi)$
2	$\frac{8}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{8}{3}$	0	0	0	0	$-\frac{14}{45}h^5 f^{(4)}(\xi)$
3	$\frac{55}{24}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{55}{24}$	0	0	0	$-\frac{95}{144}h^5 f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{66}{20}$	$-\frac{84}{20}$	$\frac{156}{20}$	$-\frac{84}{20}$	$\frac{66}{20}$	0	0	$\frac{41}{140}h^7 f^{(6)}(\xi)$
5	$\frac{4277}{1440}$	$-\frac{3171}{1440}$	$\frac{3934}{1440}$	$\frac{3934}{1440}$	$-\frac{3171}{1440}$	$\frac{4277}{1440}$	0	$\frac{5257}{8640}h^7 f^{(6)}(\xi)$
6	$\frac{3680}{945}$	$-\frac{7632}{945}$	$\frac{17568}{945}$	$-\frac{19672}{945}$	$\frac{17568}{945}$	$-\frac{7632}{945}$	$\frac{3680}{945}$	$\frac{3956}{14175}h^9 f^{(8)}(\xi)$

Tabulka 2.2: Integrační koeficienty a chyby otevřených Newton-Cotesových kvadrurních formulí

2.3. Složené formule

Newton-Cotesovy formule vyšších řádů mohou kvůli záporným integračním koeficientům občas dávat úplně nesmyslné výsledky. Proto se pro přesnější výpočty používají tzv. **složené kvadrurní formule**. Daný interval $\langle a; b \rangle$ rozdělíme na m podintervalů $\langle a_i; b_i \rangle$,

$i = 1, 2, \dots, m$ tak, že $a = a_1 < b_1 = a_2 < \dots < b_{m-1} = a_m < b_m = b$ a na každý z těchto podintervalů použijeme kvadraturní formuli $Q_i(f)$, obvykle stejného typu. Složená kvadraturní formule je pak dána jako součet těchto dílčích kvadraturních formulí s krokem $h = \frac{b-a}{m}$, tedy

$$Q^m(f) = \sum_{i=1}^m Q_i(f) = \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx. \quad (2.10)$$

Čím více délku podintervalů zmenšujeme, tím více se výsledná kvadraturní formule Q^m blíží k přesné hodnotě integrálu $I(f)$, viz následující věta.

Věta 2.3.1 *Nechť $a = a_1 < b_1 = a_2 < \dots < b_{m-1} = a_m < b_m = b$ je dělení intervalu $\langle a; b \rangle$, $\sigma = \max_i(b_i - a_i)$, $Q^m(f) = \sum_{i=1}^m Q_i(f)$ je složená kvadraturní formule na $\langle a; b \rangle$ a $Q_i(f) = \sum_{j=0}^{n_i} w_j^i f(x_j^i)$ je kvadraturní formule na $\langle a_i; b_i \rangle$, která má kladné koeficienty a je řádu alespoň 0. Pak pro každou funkci $f(x)$, která je na intervalu $\langle a; b \rangle$ Lipschitzovsky spojitá, platí*

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} Q^m(f) = I(f).$$

Důkaz lze nalézt např. v [2].

Stupeň přesnosti složené formule je stejný jako u její jednoduché podoby. Chceme-li zpřesnit výsledek zvýšením počtu podintervalů, je výhodnější volit jejich počet roven vždy nějaké mocnině dvou, tedy začít se dvěma podintervaly, dále je rozpůlit atd. Obecně lze postup zapsat jako

$$m_k = 2^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Výhodné je to proto, že tím zmenšíme počet potřebných dílčích výpočtů a jednou vypočtené hodnoty funkce v uzlových bodech využijeme při dalším dělení intervalu.

Nejčastěji se užívají následující složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

Složená obdélníková formule, která vznikne tak, že se daný interval $\langle a; b \rangle$ rozdělí na m podintervalů $\langle x_{i-1}; x_i \rangle$, $i = 1, 2, \dots, m$, přičemž na každý z nich se aplikuje obdélníková formule (viz obrázek 2.4).

Přibližná hodnota integrálu na jednotlivých podintervalech je

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx (x_i - x_{i-1}) f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right), \quad \text{pro } i = 1, \dots, m.$$

Tyto hodnoty poté stačí sečíst, výsledná složená obdélníková formule pro m podintervalů a $h = \frac{b-a}{m}$ bude vypadat následovně:

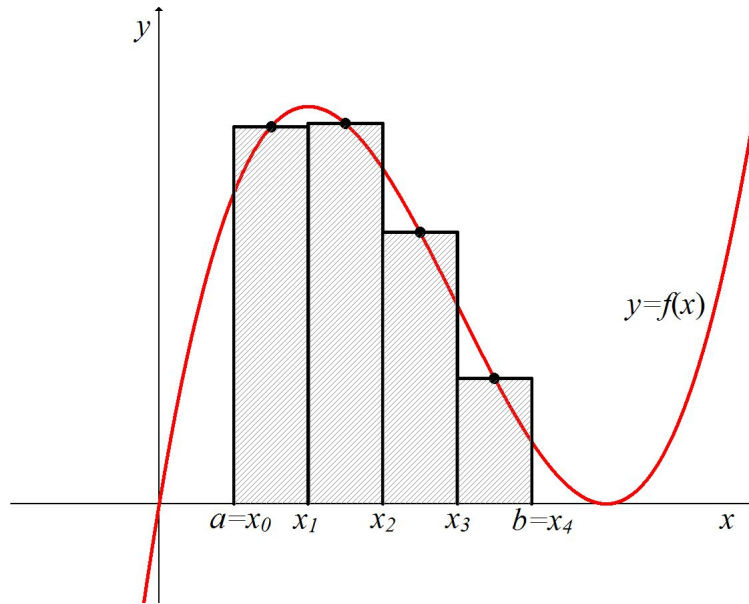
$$I(f) \approx \frac{b-a}{m} \cdot \sum_{i=1}^m f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) = \quad (2.11)$$

$$= h \left[f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right) + \dots + f\left(\frac{x_{m-1} + x_m}{2}\right) \right] = Q_{Obd}^m. \quad (2.12)$$

Jelikož je formule prostým součtem jednotlivých formulí, pak je i celková chyba součtem jednotlivých chyb

$$R_{Obd}^m(f) = -\frac{h^3}{24} \sum_{i=1}^m f''(\xi_i) = -\frac{h^3}{24} m \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f''(\xi_i) \right] = -\frac{b-a}{24} h^2 f''(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

2.3. SLOŽENÉ FORMULE



Obrázek 2.4: Princip složené obdélníkové formule pro 4 podintervaly

Následující věta vyjadřuje chybu pro libovolnou složenou Newton-Cotesovu kvadraturní formuli.

Věta 2.3.2 *Nechť je použita složená Newton-Cotesova kvadraturní formule pro n sudé. Pokud $f \in C^{n+2}\langle a; b \rangle$, tak pro diskretizační chybu formule platí*

$$R_m^n(f) = \begin{cases} \frac{(b-a)M_n}{(n+2)^{n+3}(n+2)!} h^{n+2} f^{(n+2)}(\xi) & \text{pro složené otevřené formule,} \\ \frac{(b-a)M_n}{n^{n+3}(n+2)!} h^{n+2} f^{(n+2)}(\xi) & \text{pro složené uzavřené formule,} \end{cases}$$

kde $\xi \in \langle a; b \rangle$ a M_n je stejné jako ve větě (2.1.1). Z toho plyne, že algebraický řád formule je $n+1$.

Obdobně pro složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule pro n liché platí: pokud $f \in C^{n+1}\langle a; b \rangle$, tak

$$R_m^n(f) = \begin{cases} \frac{(b-a)K_n}{(n+2)^{n+2}(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) & \text{pro složené otevřené formule,} \\ \frac{(b-a)K_n}{n^{n+2}(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) & \text{pro složené uzavřené formule,} \end{cases}$$

kde $\xi \in \langle a; b \rangle$ a M_n je stejné jako ve větě (2.1.1). Z toho plyne, že algebraický řád formule je n .

Důkaz věty lze nalézt např. v [17].

Složená lichoběžníková formule vychází z kvadraturních formulí (2.5) a (2.10), označíme-li $h = \frac{b-a}{m}$ a má tvar

$$\begin{aligned} I(f) &\approx \frac{h}{2} \cdot \sum_{i=1}^m [f(x_{i-1}) + f(x_i)] = \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_i) + f(x_m) \right) = \\ &= \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)] = Q_{Lich}^m. \end{aligned}$$

Chybu můžeme vyjádřit z věty (2.3.2) jako

$$R_{Lich}^m(f) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\xi) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Složená Simpsonova formule vychází z kvadraturních formulí (2.7) a (2.10). Pro přehlednost zde uijeme značení $f_i = f(x_i)$ a $f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_i + \frac{h}{2})$ a $h = \frac{b-a}{m}$. Pak dostaneme vztah

$$\begin{aligned} I(f) &\approx \frac{h}{6} (f_0 + 4f_{\frac{1}{2}} + f_1) + \frac{h}{6} (f_1 + 4f_{\frac{3}{2}} + f_2) + \dots + \frac{h}{6} (f_{m-1} + 4f_{m-\frac{1}{2}} + f_m) = \\ &= \frac{h}{6} \left(f_0 + 4f_{\frac{1}{2}} + 2f_1 + 4f_{\frac{3}{2}} + 2f_2 + \dots + 2f_{m-1} + 4f_{m-\frac{1}{2}} + f_m \right) = Q_{Simps}^m(f). \end{aligned}$$

Chyba této formule má tvar

$$\begin{aligned} R_{Simps}^m(f) &= -\frac{1}{90} \sum_{i=1}^m \left(\frac{h}{2} \right)^5 f^{(4)}(\xi_i) = -\frac{1}{90} \frac{h^5}{2^5} m \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f^{(4)}(\xi_i) \right) = \\ &= -\frac{1}{90} \frac{b-a}{32} h^4 f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle. \end{aligned}$$

Složená Booleova formule vychází z kvadraturních formulí (2.8) a (2.10), $h = \frac{b-a}{m}$ a nabývá tvaru

$$\begin{aligned} I(f) &\approx \frac{h}{90} \sum_{i=0}^{m-1} \left(7f_i + 32f_{i+\frac{1}{4}} + 12f_{i+\frac{1}{2}} + 32f_{i+\frac{3}{4}} + 7f_{i+1} \right) = \\ &= \frac{h}{90} \left[7(f_0 + f_m) + \sum_{i=0}^m \left[32(f_{i+\frac{1}{4}} + f_{i+\frac{3}{4}}) + 12f_{i+\frac{1}{2}} \right] + \sum_{i=0}^{m-1} 14f_i \right] = Q_{Bool}^m(f). \end{aligned}$$

Chybu můžeme vyjádřit z věty (2.3.2) jako

$$R_{Bool}^m(f) = -\frac{b-a}{1935360} h^6 f^{(6)}(\xi), \quad \text{kde } \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Pro vyšší n se složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule obvykle nepoužívají, protože už jsou výpočtově více náročné a přesnějších výsledků lze dosáhnout zjemněním daného intervalu.

2.4. Konvergence

Jednou ze zkoumaných vlastností kvadraturních formulí je jejich stabilita. Z obou tabulek (2.1) a (2.2) vidíme, že integrační koeficienty od $n \geq 8$ u uzavřených kvadraturních formulí a od $n \geq 2$ u otevřených kvadraturních formulí mohou nabývat záporných hodnot. Tento fakt může mít zásadní vliv na stabilitu těchto formulí, neboť při výpočtu dochází k zaokrouhlovacím chybám. Proto se Newton-Cotesovy kvadraturní formule se zápornými integračními koeficienty nepoužívají. Konvergenci zkoumáme jako normu kvadratury Q_n , která je dána vztahem $\|Q_n\| = \sum_{i=0}^n |w_i|$. Pokud bychom se na tuto normu dívali z pohledu funkcionální analýzy, pak konvergenci normy zajistíme Banachovou-Steinhausovou větou. Ta nám říká, že kvadraturní formule $Q_n(f)$ konverguje k funkcionálu $F(f)$ pro všechny $f \in C^{(0)}(-1; 1)$ právě tehdy, když jsou splněny následující dvě podmínky:

1. existuje kladná konstanta K taková, že $\sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| \leq K$ pro každé n ,
2. $Q_n(f)$ konverguje k $F(f)$ pro každý polynom f .

Tato podmínka je nutná a postačující pro konvergenci kvadratury. Ovšem hned první podmínku Newton-Cotesova kvadratura nesplňuje, protože neexistuje žádná konstanta K taková, že $\sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| \leq K$ pro všechna n , tudíž pak dokážeme lehce nalézt polynom f , pro který formule nekonverguje. Ideálním příkladem je posloupnost spojitých funkcí f_n , které jsou lineární mezi sousedícími uzly, jejichž hodnota shora v uzlu x_i je rovna koeficientu w_i a navíc platí $|f_n(x_i)| \neq 1$. Vzhledem k neomezenosti normy Q_n existuje podposloupnost $n_k \in \mathbb{N}$, pro kterou platí

$$\|Q_{n_k}\| \leq k \cdot k!$$

a tedy norma jde do nekonečna pro $k \rightarrow \infty$. Tato norma se rapidně zvětšuje s rostoucím n právě kvůli záporným koeficientům w_i . Proto se Newton-Cotesovy kvadraturní formule používají pro relativně malé n .

3. Gaussovy kvadraturní formule

Gaussovy kvadraturní formule aproximují integrál

$$I(f) = \int_a^b w(x)f(x) dx,$$

kde $w(x)$ je váhová funkce. Konstruuji se ve formě součtu (1.1), přičemž uzly těchto kvadraturních formulí jsou voleny tak, aby bylo dosaženo maximálního řádu. Oproti Newton-Cotesovým formulím jsou Gaussovy formule při stejném počtu uzlů mnohem přesnější, jejich nevýhodou je ale komplikovanější hledání uzlových bodů a koeficientů.

Obecný předpis Gaussovy kvadratury má tvar

$$\int_a^b w(x)f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (3.1)$$

kde $w(x)$ je váhová funkce, x_i jsou uzly a $w_i = \int_a^b w(x)\varphi_i(x) dx$, $i = 0, 1, \dots, n$, jsou koeficienty kvadraturní formule.

Dříve než uvedeme následující větu, tak zavedeme označení množiny polynomů stupně nejvýše n symbolem Π_n a $\bar{\Pi}_n$ bude množina všech normovaných polynomů stupně n , tj. polynomů s koeficientem rovným jedné u nejvyšší mocniny.

Věta 3.0.1 *Nechť kvadraturní formule*

$$Q(f) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

má stupeň přesnosti alespoň n . Nechť $\{P_n\}$, $P_n \in \bar{\Pi}_n$, $n = 0, 1, \dots$ tvoří ortogonální systém na intervalu $\langle a; b \rangle$ vzhledem k váhové funkci w . Pak tato formule má stupeň přesnosti $2n+1$ právě tehdy, když uzly této kvadraturní formule jsou kořeny polynomu $P_{n+1} \in \bar{\Pi}_{n+1}$.

Důkaz věty lze nalézt například v [7].

Z uvedené věty plyne, že uzly x_i , $i = 0, \dots, n$, Gaussových kvadraturních formulí budeme hledat, z důvodů dosažení vyšší přesnosti, jako kořeny ortogonálních polynomů.

Následující věta obsahuje dvě důležité vlastnosti koeficientů Gaussových kvadraturních formulí.

Věta 3.0.2 *Pro koeficienty Gaussovy kvadraturní formule platí:*

$$w_i > 0, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

$$\sum_{i=0}^n w_i = \int_a^b w(x) dx.$$

Důkaz věty lze nalézt v [7].

Koeficienty w_i lze spočítat více způsoby. První způsob, jak můžeme získat tyto koeficienty, je přímo integrací interpolačního polynomu

$$w_i = \int_a^b w(x) \varphi_i(x) dx, \quad (3.2)$$

kde $w(x)$ je váhová funkce a $\varphi_i(x)$ jsou Lagrangeovy báze (1.4), kde $\pi_{n+1}(x) \equiv P_{n+1}(x)$.

Druhý způsob vychází z věty (1.1.1) a z věty (3.0.2). Jsou-li dány uzly kvadraturní formule $x_0, \dots, x_n, x_i \neq x_k$ pro $i \neq k$, můžeme vždy najít koeficienty w_0, \dots, w_n tak, aby stupeň přesnosti byl roven n , neboť systém rovnic

$$\sum_{i=0}^n w_i x^k = \int_a^b x^k w(x) dx, \quad k = 0, \dots, n \quad (3.3)$$

má právě jedno řešení. Pro dané uzly existuje tedy právě jedna posloupnost koeficientů w_0, \dots, w_n .

Třetí způsob využívá Christoffelovy-Darbouxovy identity

$$\sum_{k=0}^n \frac{P_k(x)P_k(y)}{\gamma_k} = \frac{P_{n+1}(x)P_n(y) - P_n(x)P_{n+1}(y)}{\alpha_n \gamma_n (x - y)}, \quad (3.4)$$

kde $P_n, n = 0, 1, \dots$, je posloupnost ortogonálních polynomů pro interval $\langle a; b \rangle$ vzhledem k váhové funkci w , $\alpha_k = \frac{A_{k+1}}{A_k}$, $\gamma_k = \int_a^b w(x) P_k^2(x) dx$ a A_k je koeficient u nejvyšší mocniny v polynomu $P_k(x)$.

Položíme-li v (3.4) $y = x_i$, kde x_i je kořen polynomu $P_n(x)$, dostaneme

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{P_k(x)P_k(x_i)}{\gamma_k} = -\frac{P_n(x)P_{n+1}(x_i)}{\alpha_n \gamma_n (x - x_i)}.$$

Násobíme-li nyní obě strany této rovnice funkcí $w(x)P_0(x)$, integrujeme-li je přes interval $\langle a; b \rangle$ a využijeme-li vlastnosti ortogonalit, tj. $\int_a^b w(x)P_n(x)P_m(x) dx = 0$ pro $n \neq m$, dostaneme

$$\frac{P_0(x_i)}{\gamma_0} \gamma_0 = -\frac{P_{n+1}(x_i)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b w(x) \frac{P_0(x)P_n(x)}{x - x_i} dx. \quad (3.5)$$

Využijeme-li vztahu (3.2), Lagrangeových bází (1.4), kde $\pi_n(x) = P_n(x)$, a dále toho, že $P_0(x)$ je konstanta, můžeme vztah (3.5) přepsat na

$$\begin{aligned} 1 &= -\frac{P_{n+1}(x_i)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b w(x) \frac{P_n(x)}{x - x_i} dx = \\ &= -\frac{P_{n+1}(x_i)P'_n(x_i)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b w(x) \varphi_i(x) dx = \\ &= -\frac{P_{n+1}(x_i)P'_n(x_i)}{\alpha_n \gamma_n} w_i. \end{aligned}$$

Odtud již vidíme, že

$$w_i = -\frac{A_{n+1}}{A_n} \frac{\gamma_n}{P_{n+1}(x_i)P'_n(x_i)}, \quad i = 1, \dots, n,$$

což lze ještě upravit na tvar

$$w_i = \frac{A_{n+1}}{A_n} \frac{\gamma_n}{P'_{n+1}(x_i)P_n(x_i)}, \quad i = 0, \dots, n. \quad (3.6)$$

Chybu Gaussovy kvadraturní formule popisuje následující věta.

Věta 3.0.3 *Nechť $f \in C^{2n+2}\langle a; b \rangle$. Chybu Gaussovy kvadraturní formule lze vyjádřit ve tvaru*

$$R(f) = \frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b w(x) P_{n+1}^2(x) dx, \quad \xi \in \langle a; b \rangle, \quad (3.7)$$

kde $P_{n+1}(x)$ je ortogonální polynom s váhou w na $\langle a; b \rangle$ pro $\forall x$.

Důkaz lze nalézt např. v [7].

Pro Gaussovy formule platí ještě jedna vlastnost, že s rostoucím počtem uzlů konverguje posloupnost Gaussových formulí k přesné hodnotě integrálu. Tuto vlastnost nemají všechny kvadraturní formule (např. Newton-Cotesovy formule), obecně totiž není splněn předpoklad, že součet absolutních hodnot koeficientů je stejnoměrně ohraničený pro všechna n .

3.1. Gaussova-Legendreova kvadraturní formule

Jak již bylo uvedeno v podkapitole 1.2 o ortogonálních polynomech, Legendreovy polynomy pro $n = 0, 1, \dots$ jsou ortogonální s váhou $\omega(x) = 1$ na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ a jsou definované rekurentně předpisem

$$L_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x L_n(x) - \frac{n}{n+1} L_{n-1}(x), \quad (3.8)$$

kde $L_0(x) = 1, L_1(x) = x$. Kořeny polynomu L_n jsou symetricky rozloženy kolem bodu 0, přičemž pro sudý stupeň polynomu L_n obsahuje polynom pouze sudé mocniny x a pro lichý stupeň obsahuje polynom pouze liché mocniny x .

Uzly x_i , pro $i = 0, 1, \dots, n$, Gaussovy-Legendreovy kvadraturní formule jsou kořeny Legendreova polynomu L_{n+1} a integrační koeficienty $w_i, i = 0, \dots, n$, lze spočítat z (3.2), (3.3), nebo (3.6).

Poznámka 3.1.1 *Dle věty (3.0.2) je součet integračních koeficientů pro Gauss-Legendreovu kvadraturní formulí roven 2.*

Nyní si ukážeme výpočet uzlů a koeficientů Gauss-Legendreovy kvadraturní formule pro $n = 3$. Uzly x_0, \dots, x_3 jsou kořeny Legendreova polynomu L_4

$$\begin{aligned} L_4 &= \frac{7}{3}x \left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \right) - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \right) = \\ &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \end{aligned}$$

3.1. GAUSSOVA-LEGENDREOVA KVADRATURNÍ FORMULE

které spočteme zavedením substituce $t = x^2$. Tyto uzly tedy jsou

$$\begin{aligned}x_0 &= \sqrt{\frac{1}{7} \left(3 - 2\sqrt{\frac{6}{5}} \right)} \doteq 0,3399810436, & x_2 &= -\sqrt{\frac{1}{7} \left(3 - 2\sqrt{\frac{6}{5}} \right)} \doteq -0,3399810436, \\x_1 &= \sqrt{\frac{1}{7} \left(3 + 2\sqrt{\frac{6}{5}} \right)} \doteq 0,8611363116, & x_3 &= -\sqrt{\frac{1}{7} \left(3 + 2\sqrt{\frac{6}{5}} \right)} \doteq -0,8611363116.\end{aligned}$$

Nyní spočítáme koeficienty. Použijeme-li první způsob (3.2), kde $\pi_4 = L_4 = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$, $w(x) = 1$ a $L'_4(x_i) = \frac{1}{2}(35x_i^3 - 15x_i)$, dostáváme

$$w_i = \int_{-1}^1 \frac{\frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)}{(x - x_i)(\frac{35}{2}x_i^3 - \frac{15}{2}x_i)} dx, \quad i = 0, \dots, 3.$$

Zintegrováním dostaneme

$$\begin{aligned}w_0 &= \frac{18 + \sqrt{30}}{36} \doteq 0,6521451549, & w_2 &= \frac{18 + \sqrt{30}}{36} \doteq 0,6521451549, \\w_1 &= \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \doteq 0,3478548451, & w_3 &= \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \doteq 0,3478548451.\end{aligned}$$

Užitím druhého způsobu (3.3) dostáváme

$$\begin{aligned}w_0 + w_1 + w_2 + w_3 &= \int_{-1}^1 1 dx = 2, \\w_0x_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 &= \int_{-1}^1 x dx = 0, \\w_0x_0^2 + w_1x_1^2 + w_2x_2^2 + w_3x_3^2 &= \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}, \\w_0x_0^3 + w_1x_1^3 + w_2x_2^3 + w_3x_3^3 &= \int_{-1}^1 x^3 dx = 0,\end{aligned}$$

což je soustava 4 rovnic o 4 neznámých, z nichž opět dopočítáme koeficienty

$$\begin{aligned}w_0 &= \frac{18 + \sqrt{30}}{36} \doteq 0,6521451549, & w_2 &= \frac{18 + \sqrt{30}}{36} \doteq 0,6521451549, \\w_1 &= \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \doteq 0,3478548451, & w_3 &= \frac{18 - \sqrt{30}}{36} \doteq 0,3478548451.\end{aligned}$$

Při užití třetího způsobu musíme nejdřív ve vzorci (3.6) dosadit za $P_{n+1}(x) = L_{n+1}(x)$, koeficient A_n u nejvyšší mocniny x^n Legendreova polynomu $L_n(x)$ je

$$A_n = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \text{ a tedy } \frac{A_{n+1}}{A_n} = \frac{[2(n+1)]!}{2^{n+1}[(n+1)!]^2} \frac{2^n(n!)^2}{(2n)!} = \frac{2n+1}{n+1}, \quad (3.9)$$

a γ_n je dle (1.13)

$$\gamma_n = \int_{-1}^1 [L_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}. \quad (3.10)$$

3. GAUSSOVY KVADRATURNÍ FORMULE

Dosazením (3.9) a (3.10) do (3.6) dostáváme

$$w_i = \frac{2}{(n+1)L_n(x_i)L'_{n+1}(x_i)},$$

což lze ještě upravit na

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[L'_{n+1}(x_i)]^2}, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (3.11)$$

Dosazením do (3.11) za $n = 3$ nyní opět získáme koeficienty

$$\begin{aligned} w_0 &= \frac{2}{(1-x_0^2)[L'_4(x_0)]^2} = \frac{18+\sqrt{30}}{36}, & w_2 &= \frac{2}{(1-x_2^2)[L'_4(x_2)]^2} = \frac{18+\sqrt{30}}{36}, \\ w_1 &= \frac{2}{(1-x_1^2)[L'_4(x_1)]^2} = \frac{18-\sqrt{30}}{36}, & w_4 &= \frac{2}{(1-x_4^2)[L'_4(x_4)]^2} = \frac{18-\sqrt{30}}{36}. \end{aligned}$$

Tento způsob je zcela nejjednodušší a nejpraktičtější.

Výsledná Gauss-Legendreova kvadratura formule spolu s chybou (3.7) je tvaru

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + \frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^1 P_{n+1}^2(x) dx, \quad \xi \in \langle -1; 1 \rangle, \quad (3.12)$$

kde $P_{n+1}^2(x) = (x-x_0)^2 \dots (x-x_n)^2$.

Poznámka 3.1.2 Chyba Gaussovy-Legendreovy formule se dá vyjádřit i ve tvaru

$$R(f) = \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} f^{2n+2}(\xi) \quad \xi \in \langle -1; 1 \rangle.$$

Důkaz lze nalézt v [7].

V následující tabulce (3.1) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba Gaussovy-Legendreovy formule pro $n = 1, \dots, 4$.

n	x_i	w_i	Chyba
1	$\pm \frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\frac{f^{(4)}(\xi)}{135}$
2	$\pm \sqrt{3/5}$ 0	$\frac{5}{9}$ $\frac{8}{9}$	$\frac{f^{(6)}(\xi)}{15750}$
3	$\pm \sqrt{\frac{1}{7}(3+2\sqrt{6/5})}$ $\pm \sqrt{\frac{1}{7}(3-2\sqrt{6/5})}$	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$ $\frac{18+\sqrt{30}}{36}$	$\frac{f^{(8)}(\xi)}{3472875}$
4	$\pm \frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{10/7}}$ $\pm \frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{10/7}}$ 0	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$ $\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$ $\frac{128}{225}$	$\frac{f^{(10)}(\xi)}{1237732650}$

Tabulka 3.1: Uzly, koeficienty a chyby Gaussových-Legendreových kvadraturních formulí

3.2. Gaussova-Čebyševova kvadraturní formule

Tato formule opět aproximuje integrál funkce $w(x)f(x)$ na intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ obdobně jako u Gauss-Legendreových kvadraturních formulí, avšak tentokrát má váhová funkce tvar $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ nebo $w(x) = \sqrt{1-x^2}$. Hledáme tedy Gaussovu kvadraturní formuli na výpočet integrálu

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad \text{nebo} \quad \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} f(x) dx. \quad (3.13)$$

Nejprve se budeme věnovat variantě, kdy je váhová funkce $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Polynomy, které jsou ortogonální na daném intervalu s příslušnou váhovou funkcí $w(x)$ se nazývají Čebyševovy polynomy 1. typu (viz (1.14)). Uzly $x_i, i = 0, \dots, n$, jsou kořeny Čebyševova polynomu T_{n+1} , které se dají vypočítat vztahem

$$x_i = \cos \frac{2i+1}{2n+2} \pi, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

I zde lze koeficienty w_i vypočítat pomocí vztahů (3.2), (3.3) a (3.6), přičemž pro (3.6) bereme $P_{n+1} = T_{n+1}$, koeficient A_n u nejvyšší mocniny u Čebyševových polynomů 1. typu je

$$A_n = 2^{n-1} \text{ a tedy } \frac{A_{n+1}}{A_n} = 2 \quad (3.14)$$

a γ_n je dle (1.15)

$$\gamma_n = \int_{-1}^1 \frac{T_n^2(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{2}. \quad (3.15)$$

Dosazením (3.14) a (3.15) do (3.6) dostáváme

$$w_i = \frac{\pi}{T_n(x_i)T'_{n+1}(x_i)}.$$

Jelikož

$$T'_{n+1}(x_i) = \frac{(-1)^{i+1}(n+1)}{\sin \alpha_i}, \quad T_n(x_i) = (-1)^i \sin \alpha_i,$$

kde $\alpha_i = \frac{2i+1}{2n+2} \pi$, pak dostáváme

$$w_i = \frac{\pi}{n+1}. \quad (3.16)$$

Poznámka 3.2.1 Dle věty (3.0.2) je součet integračních koeficientů pro Gauss-Čebyševovu kvadraturní formuli roven π .

I zde si ukážeme výpočet uzlů a integračních koeficientů pro $n = 3$. Uzly x_0, \dots, x_3 , jsou kořeny Čebyševova polynomu $T_4 = 8x^4 - 8x^2 + 1$

$$\begin{aligned} x_0 &= \cos \frac{\pi}{8} = \frac{1}{2}\sqrt{2 + \sqrt{2}}, & x_2 &= \cos \frac{5\pi}{8} = -\frac{1}{2}\sqrt{2 - \sqrt{2}}, \\ x_1 &= \cos \frac{3\pi}{8} = \frac{1}{2}\sqrt{2 - \sqrt{2}}, & x_3 &= \cos \frac{7\pi}{8} = -\frac{1}{2}\sqrt{2 + \sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Integrační koeficienty w_0, \dots, w_3 opět můžeme spočítat třemi způsoby. Použijeme-li první způsob (3.2), kde $\pi_4 = T_4 = 8x^4 - 8x^2 + 1$, $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ a $T'_4(x_i) = 32x_i^3 - 16x_i$, $i = 0, \dots, 3$, získáváme koeficienty w_0, \dots, w_3 jako

$$w_i = \int_{-1}^1 \frac{(8x^4 - 8x^2 + 1)}{\sqrt{1-x^2}(x-x_i)(32x_i^3 - 16x_i)} dx, \quad \text{pro } i = 0, \dots, 3.$$

Zintegrováním a dopočítáním se dostaneme k výsledku

$$w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = \frac{\pi}{4}.$$

Užitím druhého způsobu (3.3) dostáváme

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 + w_2 + w_3 &= \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \pi, \\ w_0x_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 &= \int_{-1}^1 \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0, \\ w_0x_0^2 + w_1x_1^2 + w_2x_2^2 + w_3x_3^2 &= \int_{-1}^1 \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{2}, \\ w_0x_0^3 + w_1x_1^3 + w_2x_2^3 + w_3x_3^3 &= \int_{-1}^1 \frac{x^3}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0, \end{aligned}$$

odkud můžeme vyřešením této soustavy opět dopočítat koeficienty, které jsou

$$w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = \frac{\pi}{4}.$$

Pro třetí způsob využijeme vzorce (3.16). Tento způsob je nejjednodušší a nejrychlejší, můžeme spočítat koeficienty w_0, \dots, w_3

$$w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = \frac{\pi}{4}.$$

Výsledná Gauss-Čebyševova kvadratura formule spolu s chybou upravenou z [9] má tvar

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi), \quad \xi \in \langle -1; 1 \rangle.$$

V následující tabulce (3.2) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba Gaussovy-Čebyševovy 1. typu formule pro $n = 1, \dots, 4$.

3.2. GAUSSOVA-ČEBYŠEVOVA KVADRATURNÍ FORMULE

n	x_i	w_i	Chyba
1	$\pm \frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{192}f^{(4)}(\xi)$
2	$\pm \frac{1}{2}\sqrt{3}$ 0	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3840}f^{(6)}(\xi)$
3	$\pm \frac{1}{2}\sqrt{2+\sqrt{2}}$ $\pm \frac{1}{2}\sqrt{2-\sqrt{2}}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{5160960}f^{(8)}(\xi)$
4	$\pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}(5+\sqrt{5})}$ $\pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}(5-\sqrt{5})}$ 0	$\frac{\pi}{5}$	$\frac{\pi}{1857945600}f^{(10)}(\xi)$

Tabulka 3.2: Uzly, integrační koeficienty a chyby Gaussových-Čebyševových kvadraturních formulí 1. typu

Gauss-Chebyševova kvadraturní formule počítá i s váhovou funkcí $w(x) = \sqrt{(1-x^2)}$, a tedy integrály

$$\int_{-1}^1 \sqrt{(1-x^2)} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

avšak tento způsob není tolik běžný, proto si uvedeme pro výpočet koeficientů w_i , $i = 0, \dots, n$, jen předpis vycházející ze vztahu (3.6).

Uzlové body jsou kořeny Čebyševova polynomu 2. typu (1.16) a mají tvar

$$x_i = \cos \frac{i+1}{n+2}\pi, \quad i = 0, \dots, n,$$

a integrační koeficienty dle (3.6) jsou

$$w_i = \frac{\pi}{n+2} \sin^2 \left(\frac{i+1}{n+2}\pi \right), \quad \text{pro } i = 0, \dots, n.$$

V následující tabulce (3.3) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba Gaussovy-Čebyševovy formule 2. typu pro $n = 1, \dots, 4$.

n	x_i	w_i
1	$\pm \frac{1}{2}$	$\frac{\pi}{4}$
2	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2}$ 0	$\frac{\pi}{8}$ $\frac{\pi}{4}$
3	$\pm \frac{1}{4}(1+\sqrt{5})$ $\pm \frac{1}{4}(1-\sqrt{5})$	$\frac{1}{5}(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8})\pi$ $\frac{1}{5}(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8})\pi$
4	$\pm \frac{\sqrt{3}}{2}$ $\pm \frac{1}{2}$ 0	$\frac{\pi}{24}$ $\frac{\pi}{8}$ $\frac{\pi}{6}$

Tabulka 3.3: Uzly a integrační koeficienty Gaussových-Čebyševových kvadraturních formulí 2. typu

3.3. Radauova a Lobattova kvadraturní formule

Dosud jsme se věnovali Gaussovým kvadraturním formulím s maximálním stupněm přesnosti, na které jsme nekladli žádné další speciální podmínky, ať už na uzlové body, nebo integrační koeficienty. Takovéto podmínky můžou být ale někdy velmi užitečné, např. když se funkce v jednom nebo obou krajních bodech chová zvláštně nebo když chceme redukovat chybu zaokrouhlení.

Předpokládejme, že z celkového množství n uzlů je $n - r$ uzlů předepsáno, tj. x_0, \dots, x_r volíme a x_{r+1}, \dots, x_n máme zadáno. Očekáváme tedy, že volbou n koeficientů a r uzlů můžeme vytvořit numerickou kvadraturu přesnou pro libovolný polynom stupně nejvýše $n + r + 1$.

Odvození obecného tvaru takového vzorce vychází z upraveného Hermitova interpolačního polynomu (1.7). Máme tedy Hermitův vzorec ve tvaru

$$f(x) = \sum_{i=0}^n s_i(x) f(x_i) + \sum_{i=0}^r t_i(x) f'(x_i),$$

kde s_i jsou dány vztahem (1.8) a t_i jsou dány vztahem (1.9). Pokud tuto rovnici vynásobíme váhovou funkcí $w(x)$ a budeme ji integrovat na intervalu $\langle a; b \rangle$, dostaneme

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i(x) f(x_i) + \sum_{i=0}^r \bar{w}_i(x) f'(x_i), \quad (3.17)$$

kde

$$w_i = \int_a^b w(x) s_i(x) dx, \quad i = 0, \dots, n,$$

$$\bar{w}_i = \int_a^b w(x) t_i(x) dx, \quad i = 0, \dots, r.$$

Lze-li zvolit x_0, \dots, x_r tak, aby bylo $\bar{w}_i = 0, i = 0, \dots, r$, dosáhli jsme žádaného výsledku. Obdobně jak v (3.5) dokážeme vyjádřit

$$w_i = -\frac{A_{r+1} \gamma_r}{A_r v(x_i) P_r'(x_i) P_{r+1}(x_i)}, \quad i = 0, \dots, r, \quad (3.18)$$

kde

$$\gamma_r = \int_a^b w(x) v(x) P_r^2(x) dx \quad (3.19)$$

a $P_r(x)$ jsou ortogonální polynomy s váhovými funkcemi $w(x), v(x)$, kde $v(x) = (x - x_{r+1}) \dots (x - x_n)$. Celý postup odvození je uveden např. v [18, s. 128-130].

My se však omezíme na interval $\langle -1; 1 \rangle$ s váhovou funkcí $w(x) = 1$. Nejprve vyšetříme případ jednoho předepsaného uzlu $x_0 = -1$. Pak je váhová funkce $v(x) = x + 1$ a ortogonální polynomy pro tyto váhové funkce mají tvar

$$P_n(x) = \frac{L_{n+1}(x) + L_n(x)}{x + 1},$$

kde $L_{n+1}(x)$ a $L_n(x)$ jsou Legendreovy polynomy. Můžeme proto vypočítat

$$\gamma_n = \frac{2}{n+1}, \quad A_n = \frac{(2n+1)!}{2^n (n+1)(n!)^2}.$$

3.3. RADAUOVA A LOBATTOVA KVADRATURNÍ FORMULE

Dosazením do (3.18) dostáváme

$$w_i = \frac{1 - x_i}{(n+1)^2 [L_n(x_i)]^2}, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$w_0 = \frac{2}{(n+1)^2}.$$

Uzly x_1, \dots, x_n jsou kořeny polynomu $P_n(x)$.

Získáváme tedy kvadraturní vzorec, jenž se nazývá **levá Radauova kvadraturní formule**

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{2}{(n+1)^2} f(-1) + \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

s diskretizační chybou

$$R(f) = \frac{2^{2n+1}(n+1)(n!)^4}{[(2n+1)!]^3} f^{(2n+1)}(\xi).$$

V následující tabulce (3.3.1) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba levé Gaussovy-Radauovy formule pro $n = 1, 2, 3, 4$.

n	x_i	w_i	Chyba
1	-1	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{27} f^{(3)}(\xi)$
	$\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$	
2	-1	$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{1125} f^{(5)}(\xi)$
	$\frac{1}{5}(1 - \sqrt{6})$	$\frac{1}{18}(16 + \sqrt{6})$	
	$\frac{1}{5}(1 + \sqrt{6})$	$\frac{1}{18}(16 - \sqrt{6})$	
3	-1,000000	0,125000	$\frac{2}{385875} f^{(7)}(\xi)$
	-0,575319	0,657689	
	0,181066	0,776387	
	0,822824	0,440925	
4	-1,000000	0,080000	$\frac{1}{56260575} f^{(9)}(\xi)$
	-0,720480	0,446207	
	-0,167181	0,623653	
	0,446314	0,562712	
	0,885792	0,287427	

Tabulka 3.3.1: Uzly, integrační koeficienty a chyby levé Gaussovy-Radauovy kvadraturní formule

Pro předepsaný uzel $x_n = 1$ je váhová funkce $v(x) = x - 1$ a ortogonální polynomy pro tyto váhové funkce mají tvar

$$P_n(x) = \frac{L_{n+1}(x) - L_n(x)}{x - 1},$$

kde $L_{n+1}(x)$ a $L_n(x)$ jsou opět Legendreovy polynomy. I tady můžeme spočítat

$$w_i = \frac{1 + x_i}{(n+1)^2 [L_n(-x_i)]^2}, \quad i = 0, \dots, n-1,$$

$$w_n = \frac{2}{(n+1)^2}.$$

Uzly x_0, \dots, x_{n-1} jsou kořeny polynomu $P_n(x)$.

Získáváme tedy kvadraturní vzorec, jenž se nazývá **pravá Radauova kvadraturní formule**

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i) + \frac{2}{(n+1)^2} f(1)$$

s diskretizační chybou

$$R(f) = \frac{2^{2n+1}(n+1)(n!)^4}{[(2n+1)!]^3} f^{(2n+1)}(\xi).$$

V následující tabulce (3.3.2) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba pravé Gaussovy-Radauovy formule pro $n = 1, 2, 3, 4$.

n	x_i	w_i	Chyba
1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{27} f^{(3)}(\xi)$
	$-\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$	
2	1	$\frac{2}{9}$	$\frac{1}{1125} f^{(5)}(\xi)$
	$\frac{1}{5}(-1 + \sqrt{6})$	$\frac{1}{18}(16 + \sqrt{6})$	
	$\frac{1}{5}(-1 - \sqrt{6})$	$\frac{1}{18}(16 - \sqrt{6})$	
3	1,000000	0,125000	$\frac{2}{385875} f^{(7)}(\xi)$
	0,575319	0,657689	
	-0,181066	0,776387	
	-0,822824	0,440925	
4	1,000000	0,080000	$\frac{1}{56260575} f^{(9)}(\xi_4)$
	0,720480	0,446207	
	0,167181	0,623653	
	-0,446314	0,562712	
	-0,885792	0,287427	

Tabulka 3.3.2: Uzly, integrační koeficienty a chyby pravé Gaussovy-Radauovy kvadraturní formule

Pokud bychom předepsali oba krajní uzlové body $x_0 = -1$ a $x_n = 1$, tak váhová funkce $v(x)$ bude mít tvar $v(x) = x^2 - 1$ a příslušné ortogonální polynomy jsou $P_{n-1}(x) = L'_n(x)$. Z toho tedy dostáváme

$$\gamma_{n-1} = -\frac{2n(n+1)}{2n+1}, \quad A_{n-1} = \frac{(2n)!}{2^n n! (n-1)!}.$$

3.3. RADAUOVA A LOBATTOVA KVADRATURNÍ FORMULE

$$w_i = \frac{2}{n(n+1)[P_n(x_i)]^2}, \quad i = 1, \dots, n-1,$$

$$w_0 = w_n = \frac{2}{(n+1)n}.$$

Přičemž uzly x_1, \dots, x_{n-1} jsou kořeny polynomu P_{n-1} .

Dostáváme tedy kvadraturní vzorec, jenž se nazývá **Lobattova kvadraturní formule**

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{2}{(n+1)n} (f(-1) + f(1)) + \sum_{i=1}^{n-1} w_i f(x_i)$$

s diskretizační chybou

$$R(f) = -\frac{n^3(n+1)2^{n+1}[(n-1)!]^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi).$$

V následující tabulce (3.3.3) jsou uvedeny uzly, koeficienty a chyba Gaussovy-Lobattovy formule pro $n = 1, \dots, 5$.

n	x_i	w_i	Chyba
1	± 1	1	$\frac{1}{3} f''(\xi_1)$
2	0 ± 1	$\frac{4}{3}$ $\frac{1}{3}$	$\frac{1}{360} f^{(4)}(\xi_2)$
3	$\pm \frac{1}{5} \sqrt{5}$ ± 1	$\frac{1}{6}$ $\frac{1}{6}$	$\frac{1}{94500} f^{(6)}(\xi_3)$
4	0 $\pm \sqrt{\frac{3}{7}}$ ± 1	$\frac{32}{45}$ $\frac{49}{90}$ $\frac{1}{10}$	$\frac{1}{44452800} f^{(8)}(\xi_4)$
5	± 1 $\pm \sqrt{\frac{1}{21}(7-2\sqrt{7})}$ $\pm \sqrt{\frac{1}{21}(7+2\sqrt{7})}$	$\frac{1}{15}$ $\frac{1}{30}(14+\sqrt{7})$ $\frac{1}{30}(14-\sqrt{7})$	$\frac{1}{33006204000} f^{(10)}(\xi_5)$

Tabulka 3.3.3: Uzly, integrační koeficienty a chyby Gaussových-Lobattových kvadraturních formulí

Gaussovy kvadraturní formule se můžou použít i ve tvaru složených vzorců, tzn. že pro větší přesnost se daný interval $\langle a; b \rangle$ rozdělí na několik podintervalů a integrál se poté počítá jako součet jednotlivých dílčích integrálů.

Jak již bylo zmíněno v (1.17), pokud bychom chtěli integrovat na jiném intervalu, než $\langle -1; 1 \rangle$, museli bychom provést lineární transformaci zavedením substituce

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t, \quad t \in \langle -1; 1 \rangle$$

čímž transformujeme původní integrál z intervalu $\langle a; b \rangle$ na integrál přes interval $\langle -1; 1 \rangle$

$$\int_a^b w(x)f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 w\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) dt. \quad (3.20)$$

4. Clenshaw-Curtisovy formule

Clenshaw-Curtisovy formule vychází z toho, že složená lichoběžníková formule je velmi přesná při integraci dostatečně hladké periodické funkce, pokud je délka integračního intervalu $\langle a; b \rangle$ celým násobkem periody. I když může být funkce $f(x)$ hladká a periodická skoro na celém intervalu, často se stává, že v koncových uzlech periodická není, což velmi zvyšuje chybu formule, proto provedeme transformaci proměnných, abychom z neperiodické funkce $f(x)$ získali periodickou funkci $g(\theta)$.

Počítáme-li integrál

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx, \quad (4.1)$$

tak zavedením substituce $x = \cos \theta$ dostaneme funkci

$$g(\theta) \equiv f(\cos \theta),$$

kteřá má několik zajímavých vlastností:

- (a) je to periodická funkce s periodou $T = 2\pi$,
- (b) je sudá, tj. $g(\theta) = g(-\theta)$.
- (c) pro $\theta \in \langle 0; \pi \rangle$ je $x \in \langle -1; 1 \rangle$.

Vlastnost (a) nám zajišťuje, že pro funkci $g(\theta)$ existuje Fourierův rozvoj s periodou $\omega_0 = \frac{2\pi}{T} = 1$ a vlastnost (b) nám říká, že tento rozvoj bude mít pouze kosinové členy. Fourierův rozvoj funkce $g(\theta)$ bude tedy následující

$$g(\theta) = \frac{a_0}{2} + \sum_{v=1}^{\infty} a_v \cos(v\theta), \quad (4.2)$$

kde koeficienty a_v můžeme vyjádřit ve tvaru

$$a_v = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} g(\theta) \cos(v\theta) d\theta. \quad (4.3)$$

Nyní provedeme v integrálu (4.1) zmíněnou substituci $x = \cos \theta$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_0^\pi f(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_0^\pi g(\theta) \sin \theta d\theta, \quad (4.4)$$

a za $g(\theta)$ dosadíme (4.2), tím dostáváme

$$\int_0^\pi g(\theta) \sin \theta d\theta = \int_0^\pi \left\{ \frac{a_0}{2} + \sum_{v=1}^{\infty} a_v \cos(v\theta) \right\} \sin \theta d\theta.$$

Po roznásobení a úpravě předchozího vztahu máme

$$\int_0^\pi g(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{a_0}{2} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta}_2 + \sum_{v=0}^{\infty} a_v \underbrace{\left\{ \int_0^\pi \cos(v\theta) \sin \theta d\theta \right\}}_{\frac{1+(-1)^v}{1-v^2}},$$

odkud vidíme, že pro liché v je druhý integrál roven nule a pro sudé v tento integrál vychází $\frac{2}{1-v^2}$. Pak tedy můžeme integrál z (4.4) přepsat jako

$$\int_0^\pi f(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta = a_0 + \sum_{\substack{v=0 \\ v \text{ sudé}}}^\infty \frac{2a_v}{1-v^2}.$$

Jelikož v koeficientech a_v je integrand sudá funkce, můžeme integrovat přes poloviční interval a výsledek zdvojnásobit, (4.3) tedy upravíme na tvar

$$a_v = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi f(\cos \theta) \cos(v\theta) \, d\theta.$$

Na výpočet tohoto integrálu použijeme složenou lichoběžníkovou formuli

$$a_v \approx \frac{2}{n} \sum_{j=0}^n{}'' f(\cos \theta_j) \cos(v\theta_j), \quad (4.5)$$

pro uzlové body $\theta_j = \frac{j\pi}{n}, j = 0, \dots, n$, kde symbol \sum'' znamená, že první a poslední prvek sumy má poloviční hodnotu.

Pro další úpravy bude výhodnější zapsat vztah (4.5) ve tvaru

$$a_v = \sum_j \Lambda_{jv} f(t_j), \quad (4.6)$$

kde uzlové body $t_j = \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right)$ jsou Čebyševovy uzly a

$$\Lambda_{jv} = \begin{cases} \frac{1}{n} \cos\left(\frac{jv\pi}{n}\right) & \text{pro } j = 0, \\ \frac{2}{n} \cos\left(\frac{jv\pi}{n}\right) & \text{pro } j = 1, \dots, n-1, \\ \frac{1}{n} \cos\left(\frac{jv\pi}{n}\right) & \text{pro } j = n. \end{cases}$$

Jelikož zkoumáme funkci $f(t_j)$ ve stejných uzlech, jako počítáme hodnoty koeficientů a_v , můžeme přepsat (4.6) ve formě matic

$$\mathbf{a} = \mathbf{\Lambda} \mathbf{f},$$

kde \mathbf{a} je vektor koeficientů a_v o délce $n+1$, $\mathbf{\Lambda}$ je matice $(n+1) \times (n+1)$ koeficientů Λ_{jv} a \mathbf{f} je vektor $(f(t_0), \dots, f(t_n))$ o délce $n+1$, kde

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f(t_0) \\ f(t_1) \\ \vdots \\ f(t_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \frac{2}{n} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & 1 & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \cos \frac{\pi}{n} & \cos \frac{2\pi}{n} & \dots & \frac{1}{2} \cos \pi \\ \frac{1}{2} & \cos \frac{2\pi}{n} & \cos \frac{4\pi}{n} & \dots & \frac{1}{2} \cos 2\pi \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} & \cos \pi & \cos 2\pi & \dots & \frac{1}{2} \cos n\pi \end{pmatrix}$$

Zavedeme-li ještě označení

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_0 \\ W_1 \\ \vdots \\ W_n \end{pmatrix}, \quad \text{kde } W_v = \begin{cases} 1 & \text{pro } v = 0, \\ \frac{2}{1-v^2} & \text{pro } v \neq 0 \text{ sudé}, \\ 0 & \text{pro } v \text{ liché.} \end{cases}$$

Pak můžeme integrál (4.1) zapsat ve tvaru

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \mathbf{W}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{f}$$

nebo

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \mathbf{w}^T \mathbf{f}, \quad (4.7)$$

kde $\mathbf{w} \equiv \mathbf{\Lambda}^T \mathbf{W}$. Ze vztahu (4.7) tedy máme

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{j=0}^n w_j f(t_j).$$

Pro snazší počítání se integrační koeficienty w_i pro sudé n vyjadřují v explicitním tvaru, viz [19]

$$w_i = \begin{cases} \frac{1}{n^2 - 1} & \text{pro } i = 0, \\ \frac{2}{n} \left[1 + \left\{ \sum_{N=1}^{n/2-1} \left(\frac{2}{1 - 4N^2} \right) \cos \left(\frac{2i\pi N}{n} \right) \right\} + \frac{\cos i\pi}{1 - n^2} \right] & \text{pro } i = 1, \dots, n-1, \\ \frac{1}{n^2 - 1} & \text{pro } i = n. \end{cases} \quad (4.8)$$

Pro ilustraci výpočtu uzlových bodů a integračních koeficientů uvedeme pro $n = 4$, kde bereme za uzlové body kořeny Čebyševova polynomu $T_5(\cos \theta)$

$$\begin{aligned} T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \\ T_5(\cos \theta) &= 16\cos^5 \theta - 20\cos^3 \theta + 5\cos \theta = \cos(5\theta) \\ \theta &= \frac{j\pi}{n} \Rightarrow \cos \left(\frac{5j\pi}{4} \right) = 0, \quad \text{pro } j = 0, \dots, 4, \end{aligned}$$

odkud už jednoduše spočítáme $x_i, i = 0, \dots, 4$

$$\begin{aligned} x_0 &= \cos 0 = 1, & x_3 &= \cos \frac{15\pi}{4} = \cos \frac{7\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ x_1 &= \cos \frac{5\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}, & x_4 &= \cos \frac{20\pi}{4} = \cos \pi = -1, \\ x_2 &= \cos \frac{10\pi}{4} = \cos \frac{\pi}{2} = 0, \end{aligned}$$

a integrační koeficienty vypočítáme ze vzorce (4.8) jako

$$\begin{aligned} w_0 &= \frac{1}{15}, \\ w_1 &= \frac{2}{4} \left[1 + \frac{2}{1-4} \cos\left(\frac{2\pi}{4}\right) + \frac{\cos \pi}{1-16} \right] = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{15} \right) = \frac{1}{2} \frac{16}{15} = \frac{8}{15}, \\ w_2 &= \frac{2}{4} \left[1 + \frac{2}{1-4} \cos\left(\frac{4\pi}{4}\right) + \frac{\cos 2\pi}{1-16} \right] = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{3}(-1) - \frac{1}{15} \right) = \frac{1}{2} \frac{24}{15} = \frac{12}{15}, \\ w_3 &= \frac{2}{4} \left[1 + \frac{2}{1-4} \cos\left(\frac{6\pi}{4}\right) + \frac{\cos 3\pi}{1-16} \right] = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{15} \right) = \frac{1}{2} \frac{16}{15} = \frac{8}{15}, \\ w_4 &= \frac{1}{15}. \end{aligned}$$

V následující tabulce (4.1) jsou uvedeny uzly a koeficienty Clenshaw-Curtisovy formule pro $n = 1, \dots, 4$.

n	1	2	3	4
x_i	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm 1 \quad 0$	$\pm 1 \quad \pm \frac{1}{2}$	$\pm 1 \quad \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \quad 0$
w_i	1	$\frac{1}{3} \quad \frac{4}{3}$	$\frac{1}{9} \quad \frac{8}{9}$	$\frac{1}{15} \quad \frac{8}{15} \quad \frac{12}{15}$

Tabulka 4.1: Uzly a integrační koeficienty Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule

Poznámka 4.1 *Integrační koeficienty Clenshaw-Curtisových formulí jsou všechny pozitivní a jejich součet je vždy roven 2.*

Chybu této formule můžeme vyjádřit nejméně 3 různými způsoby, záleží na tom, jak moc vysoké n zvolíme, viz [16]. Její odvození je příliš složité, proto si jen uvedeme obecný tvar chyby této formule, o které můžeme říci, že je téměř stejně velká, jako je chyba Gaussovy kvadraturní formule.

$$R(f) = \frac{1}{\pi i} \int_C \frac{[Q_{n+1}^*(z) - Q_{n-1}^*(z)]}{[T_{n+1}(z) - T_{n-1}(z)]} f(z) dz,$$

kde

$$Q_n^*(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{T_n(x)}{z - x} dx$$

je analytická funkce o jedné proměnné v z -ové rovině bez intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ a T_n je Čebyševův polynom stupně n . Celé odvození lze nalézt v [3].

Stabilitu této formule nám zajišťuje Fourierova řada a obecná Paley-Weinerova věta, která říká, že pro spojitě neperiodické funkce Fourierovy koeficienty klesají rychlostí $\frac{1}{v}$ a pro spojitě periodické funkce klesají tyto koeficienty ještě rychleji, viz [19].

Klasické Gaussovy kvadraturní formule mající $n + 1$ uzlů integrují přesně polynomy do stupně $2n + 1$, zatímco Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule při stejném počtu uzlů integrují přesně polynomy stupně n , což se hned na první pohled jeví jako horší varianta. Realita je ovšem jiná. V praxi již bylo už dokázáno, že Clenshaw-Curtisovy kvadraturní

formule mají takřka stejnou přesnost jako Gaussovy kvadrurní formule pro stejný počet uzlů. To je zapříčiněno tím, že většina funkcí aproximována Čebyševovými polynomy rychle konverguje k přesné hodnotě. Za výhodu těchto formulí oproti Gaussovým formulím by se dalo brát, že dokážeme algoritmy Fourierovy transformace dostat integrační koeficienty pro vysoké n několikanásobně rychleji, nicméně jen zřídka se používají Gaussovy kvadrurní formule velmi vysokého řádu, protože je jednodušší použít složené Gaussovy formule nebo metodu adaptivní numerické integrace.

5. Další metody

5.1. Adaptivní integrace

Metoda adaptivní numerické integrace se proti předchozím způsobům numerického integrování liší nerovnoměrným dělením intervalu integrace $\langle a; b \rangle$. V místech, kde je integrovaná funkce dostatečně hladká a mění se pomalu, lze použít dělení intervalů hrubší. Naopak v místech, kde se integrovaná funkce mění výrazně, je vhodné použít jemnější dělení intervalů.

Integrál $I(f)$ na intervalu $\langle a; b \rangle$, dále jen $I(a, b)$, vypočítáme pomocí dvou kvadraturních formulí, které označíme jako $Q_1(a, b)$ a $Q_2(a, b)$, přičemž Q_2 je přesnější formule. Kdyby byla formule Q_2 zcela přesná, pak bychom mohli chybu $I(a, b) - Q_1(a, b)$ aproximovat výrazem $Q_2(a, b) - Q_1(a, b)$. Proto, je-li $|Q_2(a, b) - Q_1(a, b)| \leq \varepsilon$, kde ε je předepsaná tolerance, považujeme $Q(a, b) := Q_2(a, b)$ za přibližnou hodnotu integrálu $I(f)$. V opačném případě interval $\langle a; b \rangle$ rozdělíme na dva stejně dlouhé intervaly $\langle a; c \rangle$ a $\langle c; b \rangle$, kde $c = (a + b)/2$ a na těchto intervalech spočteme opět přibližné hodnoty $Q(a, c)$ a $Q(c, b)$ integrálů $I(a, c)$ a $I(c, b)$ a nakonec položíme $Q(a, b) = Q(a, c) + Q(c, b)$. Výpočet $Q(a, c)$ a $Q(c, b)$ na intervalech $\langle a; c \rangle$ a $\langle c; b \rangle$ přitom probíhá stejně, jako tomu bylo u $Q(a, b)$ na intervalu $\langle a; b \rangle$. Tento postup opakujeme, dokud není chyba integrace menší než požadovaná přesnost, nebo dokud není dosaženo maximálního počtu dělení intervalu.

Pokud bychom aplikovali metodu adaptivní integrace na Simpsonovu kvadraturní formuli, tak z kapitoly Newton-Cotesových formulí již víme, že Simpsonova formule je na intervalu $\langle a; b \rangle$ ve tvaru

$$Q_{Simps}^1 = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] - \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in \langle a; b \rangle, \quad (5.1)$$

kde $h = (b-a)/2$. Tato kvadraturní formule je v předchozích textu označená jako $Q_1(a; b)$. Jako kvadraturní formuli $Q_2(a; b)$ vezmeme složenou Simpsonovu formuli pro 2 subintervaly $\langle a; \frac{a+b}{2} \rangle, \langle \frac{a+b}{2}; b \rangle$, tedy krok dělení je $h/2 = \frac{b-a}{4}$. Aproximace integrálu je nyní ve tvaru

$$Q_{Simps}^2 = \frac{h}{6} \left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + 2f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3}{2}h\right) + f(b) \right] - \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \bar{\xi} \in \langle a; b \rangle. \quad (5.2)$$

Protože

$$\begin{aligned} Q_1(a, b) &= \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \\ Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) &= \frac{h}{6} \left[f(a) + 4f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f(a+h) \right], \\ Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) &= \frac{h}{6} \left[f(a+h) + 4f\left(a + \frac{3}{2}h\right) + f(b) \right]. \end{aligned}$$

Můžeme tedy přepsat vztah (5.2) jako

$$I(f) \approx Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) + Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) - \frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\bar{\xi}) \quad (5.3)$$

Přepokládejme, že $f^{(4)}$ se na intervalu $\langle a; b \rangle$ příliš nemění, tedy $f^{(4)}(\xi) \approx f^{(4)}(\bar{\xi})$. Za tohoto předpokladu vztahy (5.1) a (5.2) implikují

$$Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) + Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) - \frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\bar{\xi}) \approx Q_1(a, b) - \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi).$$

Odtud

$$\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \approx \frac{16}{15} \left[Q_1(a, b) - Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) - Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) \right].$$

Dosazením tohoto vyjádření do vztahu (5.3) dostaneme

$$\left| I(f) - Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) - Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) \right| \approx \frac{1}{15} \left| Q_1(a, b) - Q_1\left(a, \frac{a+b}{2}\right) - Q_1\left(\frac{a+b}{2}, b\right) \right|,$$

ze kterého vyplývá, že součet $Q_1(a, \frac{a+b}{2}) + Q_1(\frac{a+b}{2}, b) = Q_2(a; b)$ aproximuje daný integrál $I(f)$ 15krát lépe než $Q_1(a, b)$. To znamená, že součet $Q_2(a; b) = Q_1(a, \frac{a+b}{2}) + Q_1(\frac{a+b}{2}, b)$ bude aproximovat integrál $I(f)$ s přesností ε , za předpokladu, že $Q_2(a; b)$ se liší od $Q_1(a, b)$ o méně než 15ε , tj. je-li

$$|Q_1(a, b) - Q_2(a; b)| < 15\varepsilon, \quad (5.4)$$

pak

$$|I(f) - Q_2(a; b)| < \varepsilon.$$

Je-li splněna podmínka (5.4), je integrál aproximován s dostatečnou přesností a výpočet může být ukončen. Tato varianta adaptivní numerické integrace je implementována v Matlabovské funkci quad. Další používanou variantou je spojení složené Simpsonovy kvadrurní formule (coby $Q_1(a, b)$) a Booleho složené kvadrurní formule (coby $Q_2(a, b)$).

5.2. Rombergova metoda

Princip Rombergovy metody je založen na složené lichoběžníkové formuli s postupným zjemňováním dělení na $1, 2, 4, \dots, 2^k$ intervalů. Tato metoda je vhodná při výpočtech, kdy je požadovaná malá chyba aproximace. Přestože je velmi efektivní, nedá se používat univerzálně. Podmínkou je, aby existoval dostatečný počet derivací funkce $f(x)$ na celém intervalu $\langle a; b \rangle$. V opačném případě nepřináší tato metoda žádné zpřesnění výpočtu oproti složené lichoběžníkové formuli.

Jak již víme z kapitoly složených Newton-Cotesových formulí, složená lichoběžníková formule má tvar

$$Q_{Lich}^m = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)], \quad h = \frac{b-a}{m},$$

5.2. ROMBERGOVA METODA

s diskretizační chybou ve tvaru

$$R_{Lich}^m(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi), \quad \xi \in \langle a; b \rangle.$$

Naším cílem je zmenšit hodnotu chyby. Přibližný výpočet derivace lze efektivně zpřesnit metodou známou jako Richardsonova extrapolace. Při té se předpokládá, že funkce s krokem h se dá vyjádřit ve tvaru

$$I = I_{00} + Ah^2 + Bh^4 + \dots, \quad (5.5)$$

kde I je přesná hodnota integrálu, I_{00} je hodnota vypočtená s krokem h a A, B jsou neznámé koeficienty.

Když provedeme stejnou integraci s dvojnásobným krokem $2h$, dostaneme

$$I = I_{10} + A(2h)^2 + B(2h)^4 + \dots, \quad (5.6)$$

Z uvedených rovnic můžeme vyjádřit chybu úměrnou h^2 . Rovnici (5.5) vynásobíme x a rovnici (5.6) vynásobíme y a jejich sečtením dostáváme

$$(x+y)I = xI_{00} + yI_{10} + Ah^2(x+4y) + Bh^4(x+16y) + \dots$$

Chceme, aby u I byla jednička, tedy $x+y=1$, a dále aby u A byla nula, tedy $x+4y=0$. Jednoduchým výpočtem dostáváme $x=4/3$ a $y=-1/3$. Dostáváme

$$I = \frac{4}{3}I_{00} - \frac{1}{3}I_{10} + \dots$$

Pokud bychom chtěli počítat přesněji, museli bychom eliminovat i člen s chybou, u kterého je koeficient B . Ten bychom spočítali pomocí dalšího dělení intervalu

$$I = I_{11} + A(4h)^2 + B(4h)^4 + \dots,$$

stejným principem vynásobením této rovnice z a přičtením k předešlým bychom dopočítali x, y, z a měli tak přesnější formuli.

Výpočet lze přehledně zapsat do následující tabulky

h	I_{00}			
$\frac{h}{2^1}$	I_{10}	I_{11}		
$\frac{h}{2^2}$	I_{20}	I_{21}	I_{22}	
$\frac{h}{2^3}$	I_{30}	I_{31}	I_{32}	I_{33}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

kde $I_{i,0}$ je složená lichoběžníková formule s krokem $h = \frac{(b-a)}{m2^i}$, $i = 0, 1, \dots$ a koeficienty I_{ij} se dají zapsat obecně pomocí rekurentního vztahu

$$I_{ij} = \frac{4^j I_{i,j-1} - I_{i-1,j-1}}{4^j - 1}, \quad i = 1, 2, \dots, \quad j = 1, 2, \dots, i.$$

Například I_{22} bychom dostali postupně z I_{21}, I_{11} a tedy I_{20}, I_{10}, I_{00} .

Tento postup opakujeme, dokud $|I_{i,j} - I_{i-1,j-1}| < \varepsilon$, kde $\varepsilon > 0$ je námi zvolená tolerance, pak $I(f) \approx I_{ij}$.

Jelikož dělíme formuli na 2^k intervalů, můžeme říci, že tato formule konverguje ke skutečné hodnotě integrálu, protože

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2^k} = 0.$$

Poznámka 5.2.1 *Chybu Rombergovy integrace lze vyjádřit ve tvaru*

$$R_m(f) = (b-a) \left(\frac{(b-a)^2}{2^{2i-j}} \right)^{j+1} \frac{(-1)^j B_{2j+2}}{(2j+2)!} f^{(2j+2)}(\xi), \quad \xi \in \langle a; b \rangle,$$

pro funkci $f \in C^{2j+2}\langle a; b \rangle$, B_{2j+2} jsou Bernoulliho čísla, viz [18].

6. Srovnání kvadraturních formulí

Pro demonstraci rozdílností některých vybraných kvadraturních formulí je porovnáme na několika testovacích příkladech. Nejprve vždy uvedeme výsledky pro otevřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule pro $n = 0, \dots, 6$, poté pro uzavřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule pro $n = 1, \dots, 8$ a následně i pro jejich složené kvadraturní formule s dělením na $m = 5$ intervalů a poté na $m = 10$ intervalů. Pak uvedeme výsledky pro Gauss-Legendreovu kvadraturní formuli, Gauss-Čebyševovu kvadraturní formuli a Radau-Lobattovy kvadraturní formule pro $n = 1, \dots, 5$ a Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule pro $n = 1 \dots, 7$. V závěru každého příkladu si ještě ukážeme kolik dělení musíme provést, abychom dosáhli požadované přesnosti $\varepsilon = 10^{-2}$ až 10^{-10} u metody adaptivní integrace a kolik pro dosažení stejné přesnosti bylo zapotřebí provést kroků u Rombergovy integrace.

Příklad 6.1 Nejprve otestujeme jednotlivé metody při výpočtu integrálu

$$\int_{-1}^1 \frac{5}{3 + 50x^2} dx = \sqrt{\frac{2}{3}} \operatorname{arctg} \left(5\sqrt{\frac{2}{3}} \right) \doteq 1,0864$$

Otevřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

n	0	1	2	3	4	5	6
$Q(f)$	3,3333	1,1688	-0,2509	0,6032	3,1331	1,7227	-2,0756
$R(f)$	-2,2469	0,0824	1,3373	0,4832	-2,0467	-0,6363	3,1620

Uzavřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7	8
$Q(f)$	0,1887	2,2851	0,9238	0,9326	0,9674	1,3768	1,1478	0,7795
$R(f)$	0,8977	-1,1987	0,1626	0,1538	0,1191	-0,2904	-0,0614	0,3069

Složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

	$m = 5$		$m = 10$	
Formule	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
Obdélníková	1,1446	-0,0582	1,0858	0,0006
Lichoběžníková	1,0282	0,0582	1,0864	1,1335e-05
Simpsonova	1,1058	-0,0194	1,0860	0,0004
Booleova	1,0847	0,0017	1,0864	2,5707e-05

6. SROVNÁNÍ KVADRATURNÍCH FORMULÍ

Gaussovy kvadraturní formule:

	Gauss-Legendre		Gauss-Čebyšev 1. typu		Gauss-Čebyšev 2. typu	
n	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	0,5085	0,5779	0,5610	0,6847	0,5067	0,4996
2	1,6498	-0,5634	2,0039	-0,7582	1,4492	-0,4429
3	0,8296	0,2568	0,9328	0,3129	0,2520	0,7543
4	1,2755	-0,1891	1,4874	-0,2417	1,1583	-0,1520
5	0,9823	0,1042	1,1171	0,1286	0,9207	0,0856

	L-Gauss-Radau		P-Gauss-Radau		Gauss-Lobatto	
n	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	0,9238	0,1626	0,9238	0,1626	0,1887	0,8977
2	0,8730	0,2134	0,8730	0,2134	2,2851	-1,1987
3	1,0766	0,0098	1,0766	0,0098	0,6725	0,4139
4	1,0448	0,0415	1,0448	0,0415	1,4269	-0,3405
5	1,0900	-0,0036	1,0900	-0,0036	0,9149	0,1715

Poznámka 6.2 Zde je nutno poznamenat, že Gauss-Čebyševovu kvadraturní formuli 1. typu, resp. 2. typu, jsme na výpočet daného integrálu nemohli použít a proto jsme je pro výpočet těmito kvadraturními formulami upravili na tvary

$$\int_{-1}^1 \frac{5}{(3+50x^2)\sqrt{1-x^2}} dx \doteq 1,2457, \quad \text{resp.} \quad \int_{-1}^1 \frac{5\sqrt{1-x^2}}{3+50x^2} dx \doteq 1,0063.$$

Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7
$Q(f)$	0,6452	2,2851	0,5944	1,5364	0,8793	1,2308	1,0029
$R(f)$	0,4413	-1,1987	0,4920	-0,4500	0,2071	-0,1443	0,0835

Adaptivní integrace (QUAD):

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
Počet dělení	13	17	25	41	65	105	169	273	393

Rombergova integrace:

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
k	4	4	6	6	7	7	7	8	8

Otevřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule si s testovacím příkladem neporadily moc dobře. Za relativně přijatelné výsledky by se daly brát jen hodnoty pro $n = 1$ a $n = 3$. Z tabulky (2.2) si můžeme všimnout, že právě pro tyto n jsou integrační koeficienty

všechny kladné. Naopak uzavřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule si vedly obstojně. S rostoucím n se až na výjimky přibližovaly ke správné hodnotě integrálu, ale pro $n = 8$, které má záporné integrační koeficienty, viz tabulka (2.1), se už chyba opět zvětšuje. Nejlepší variantou se ukázaly složené kvadraturní formule, které dávají již pro $m = 5$ zcela nejpřesnějších výsledků. Gaussovy kvadraturní formule by pro vyšší n dávaly lepší výsledky, protože je u nich zaručena konvergence, ale již pro $n = 5$ je chyba až na Gauss-Lobattovy formule relativně malá. Můžeme si také všimnout, že levá Gauss-Radauova formule je stejně přesná jak pravá Gauss-Radauova formule. Testovací funkce je totiž symetrická podle osy y . Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule již od $n \geq 3$ konvergují ke skutečné hodnotě integrálu. Můžeme si také všimnout, že pro $n = 2$ chyba lehce uskočí podobně jak u Gauss-Čebyševové kvadraturní formule, obě tyto formule totiž berou za uzlové body kořeny Čebyševova polynomu. V posledních dvou tabulkách vidíme závislost počtu dělení na chybě při metodě adaptivní integrace a při Rombergově metodě.

Příklad 6.3 *Nyní porovnáme metody při výpočtu přibližné hodnoty integrálu*

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x^3)}{2+x} dx \doteq -0,1129$$

Otevřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

n	0	1	2	3	4	5	6
$Q(f)$	0	-0,0063	-0,0443	-0,0648	-0,1116	-0,1129	-0,1160
$R(f)$	-0,1129	-0,1066	-0,0686	-0,0481	-0,0014	-5,2273e-05	0,0031

Uzavřené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7	8
$Q(f)$	-0,5610	-0,1870	-0,1450	-0,1109	-0,1111	-0,1115	-0,1119	-0,1127
$R(f)$	0,4481	0,0741	0,0321	-0,0020	-0,0018	-0,0014	-9,7563e-04	-2,6587e-04

Složené Newton-Cotesovy kvadraturní formule:

	$m = 5$		$m = 10$	
Formule	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
Obdélníková	-0,0986	-0,0143	-0,1095	-0,0034
Lichoběžníková	-0,1408	0,0279	-0,1197	0,0068
Simpsonova	-0,1127	-2,2509e-04	-0,1129	-1,9318e-05
Booleova	-0,1129	-5,5997e-06	-0,1129	-8,5247e-08

6. SROVNÁNÍ KVADRATURNÍCH FORMULÍ

Gaussovy kvadraturní formule:

n	Gauss-Legendre		Gauss-Čebyšev 1. typu		Gauss-Čebyšev 2. typu	
	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	-0,0602	-0,0527	-0,2198	-0,1133	-0,0261	-0,0290
2	-0,1135	5,3946e-04	-0,3375	0,0045	-0,0549	-2,1699e-04
3	-0,1141	0,0012	-0,3359	0,0029	-0,0177	-0,0374
4	-0,1131	1,7873e-04	-0,3334	3,7631e-04	-0,0552	9,2443e-05
5	-0,1129	2,2189e-06	-0,3330	1,8115e-06	-0,0552	1,7534e-06

n	L-Gauss-Radau		P-Gauss-Radau		Gauss-Lobatto	
	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	-0,3969	0,2840	0,1069	-0,2198	-0,5610	0,4481
2	-0,1113	-0,0016	-0,1121	-8,4254e-04	-0,1870	0,0741
3	-0,1079	-0,0051	-0,1172	0,0043	-0,1110	-0,0019
4	-0,1121	-8,1346e-04	-0,1137	7,3383e-04	-0,1114	-0,0016
5	-0,1129	-1,3539e-05	-0,1129	1,3382e-05	-0,1127	-2,1455e-05

Poznámka 6.4 Zde je nutno poznamenat, že Gauss-Čebyševovu kvadraturní formuli 1. typu, resp. 2. typu, jsme na výpočet daného integrálu nemohli použít a proto jsme je pro výpočet těmito kvadraturními formulami upravili na tvary

$$\int_{-1}^1 \frac{\sin(x^3)}{(2+x)\sqrt{1-x^2}} dx \doteq -0,333042, \quad \text{resp.} \quad \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2} \sin(x^3)}{2+x} dx \doteq -0,055155.$$

Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7
$Q(f)$	-0,0332	-0,1870	-0,0919	-0,1120	-0,1134	-0,1131	-0,1130
$R(f)$	-0,0797	0,0741	-0,0210	-9,0603e-04	4,4743e-04	1,6851e-04	3,8843e-05

Adaptivní integrace (QUAD):

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
Počet dělení	13	13	13	13	25	41	61	97	241

Rombergova integrace:

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
k	2	4	4	4	6	6	6	6	7

Opět si můžeme všimnout, jak všechny formule pro dané $n \leq 8$ konvergují ke skutečné hodnotě integrálu s výjimkou otevřených Newton-Cotesových formulí pro $n = 6$ z důvodu záporných integračních koeficientů.

Příklad 6.5 *Počítejme přibližnou hodnotu integrálu*

$$\int_0^3 x^{\frac{5}{3}} dx = \frac{3^{\frac{11}{3}}}{8} \doteq 7,0203$$

Otevřené Newton-Cotesovy kvadrurní formule:

n	0	1	2	3	4	5	6
$Q(f)$	5,8967	6,2622	6,9995	7,0047	7,0166	7,0174	7,0191
$R(f)$	1,1236	0,7581	0,0208	0,0156	0,0037	0,0029	0,0012

Uzavřené Newton-Cotesovy kvadrurní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7	8
$Q(f)$	9,3604	7,0512	7,0367	7,0236	7,0226	7,0212	7,0210	7,0206
$R(f)$	-2,3401	-0,0310	-0,0165	-0,0034	-0,0023	-8,7943e-04	-6,6866e-04	-3,3832e-04

Složené Newton-Cotesovy kvadrurní formule:

	$m = 5$		$m = 10$	
Formule	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
Obdélníková	6,9708	0,0495	7,0077	0,0126
Lichoběžníková	7,1206	-0,1003	7,0457	-0,0254
Simpsonova	7,0207	-4,5020e-04	7,0204	-7,1266e-05
Booleova	7,0203	-4,6004e-05	7,0203	-7,2453e-06

Gaussovy kvadraturní formule

	Gauss-Legendre		Gauss-Čebyšev 1. typu		Gauss-Čebyšev 2. typu	
n	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	7,0035	0,0168	X	X	X	X
2	7,0181	0,0022	X	X	X	X
3	7,0198	5,2812e-04	X	X	X	X
4	7,0201	1,7352e-04	X	X	X	X
5	7,0202	6,9494e-05	X	X	X	X

	L-Gauss-Radau		P-Gauss-Radau		Gauss-Lobatto	
n	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$	$Q(f)$	$R(f)$
1	7,1433	-0,1230	6,9302	0,0901	9,3604	-2,3401
2	7,0294	-0,0091	7,0144	0,0059	7,0512	-0,0310
3	7,0220	-0,0017	7,0192	0,0011	7,0242	-0,0039
4	7,0208	-5,0087e-04	7,0200	3,0827e-04	7,0212	-9,3076e-04
5	7,0205	-1,8439e-04	7,0202	1,0963e-04	7,0206	-3,0451e-04

Poznámka 6.6 Gauss-Čebyševova formule obou typů na tomto intervalu vychází s kompletními čísly a proto ji nebudeme uvádět.

Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule:

n	1	2	3	4	5	6	7
$Q(f)$	6,7238	7,0512	7,0167	7,0200	7,0201	7,0202	7,0203
$R(f)$	0,2965	-0,0310	0,0035	2,5229e-04	1,6647e-04	4,0470e-05	2,4766e-05

Adaptivní integrace (QUAD):

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
Počet dělení	13	13	13	21	33	49	81	117	197

Rombergova integrace:

ε	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}
k	2	3	4	5	7	8	9	10	12

I zde můžeme posoudit funkčnost formulí, např. Rombergova integrace dosahuje pro malé k přesnějších výsledků, než metoda adaptivní integrace, avšak pro vyšší k se dostáváme na větší počet dělení a složitost výpočtů je vyšší než je např. u adaptivní integrace.

Všechny výpočty byly provedeny v softwaru Matlab R2018a.

Závěr

Cílem práce bylo uvedení kvadraturních formulí pro výpočet jednoduchého určitého integrálu, jejich aplikace a následně srovnání s dalšími adekvátními metodami. Ve druhé kapitole byla nejprve obecně popsána Newton-Cotesova kvadraturní formule, která je pro tuto problematiku asi nejznámější numerickou metodou. Tuto kapitolu jsme rozdělili do tří částí. Nejprve jsme se zabývali uzavřenými formulemi, ukázali si jejich konstrukci a uvedli jsme 8 nejzákladnějších uzavřených formulí, jejichž integrační koeficienty a chyby jsme shrnuli do tabulky (2.1). Dále jsme se zabývali otevřenými kvadraturními formulemi, ukázali si jejich rozdíl proti uzavřeným formulím a v tabulce (2.2) jsme opět souhrnně sepsali jejich integrační koeficienty a chyby pro prvních 7 otevřených formulí. Ve třetí části této kapitoly jsme uvedli ještě složené kvadraturní formule, které jsou mnohem stabilnější a přesnější než jejich jednoduché podoby. V závěru této kapitoly se pak krátce věnujeme i otázce stability Newton-Cotesových formulí.

V další kapitole jsme se zabývali Gaussovou kvadraturou, a to konkrétně Gauss-Legendreovými a Gauss-Čebyševovými formulemi. U obou formulí jsme popsali princip odvození, jejich použití a uvedli chyby, kterých se při užití jednotlivých Gaussových formulí dopustíme. V tabulkách (3.1), (3.2) a (3.3) jsme souhrnně vypsali uzlové body a integrační koeficienty až do $n = 4$. V této kapitole jsme si krátce představili i další Gaussovy kvadraturní formule, konkrétně Radauovy a Lobattovy kvadraturní formule, pro předepsané uzly.

Ve čtvrté kapitole jsme popsali princip Clenshaw-Curtisovy kvadraturní formule, který spočívá v transformaci integrované funkce na funkci periodickou a v jejím následném rozvoji do Fourierovy řady. V tabulce (4.1) jsme opět uvedli uzlové body a integrační koeficienty až do $n = 4$.

V další části práce jsme se v krátkosti ještě věnovali metodě adaptivní integrace a Rombergově metodě. U metody adaptivní integrace jsme si vysvětlili její princip, který jsme ukázali na složené Simpsonové formuli. V praxi je tato metoda často používána, protože dosahuje výsledků s požadovanou přesností, a ani není tak výpočetně náročná. Rombergovu metodu jsme uvedli pro složenou lichoběžníkovou formuli.

V poslední části jsme aplikovali jednotlivé metody na konkrétní příklady a srovnávali jejich funkčnost.

Tato práce samozřejmě nepopisuje všechny metody numerického integrování pro výpočet určitého integrálu a tak by bylo možné na tuto bakalářskou práci navázat jednak přidáním dalších metod jako jsou metoda půlení intervalu, Gauss-Jacobiova metoda, atd. Dále bychom se v rámci této problematiky mohli věnovat i numerickým metodám pro výpočet integrálů neurčitých a také numerickému výpočtu vícerozměrných integrálů.

Reference

- [1] ČERMÁK, Libor. *Vybrané statě z numerických metod*. [online]. [cit. 2018-03-31]. Dostupné z: <http://mathonline.fme.vutbr.cz/Numericke-metody-I/sc-1150-sr-1-a-141/default.aspx>
- [2] ČERMÁK, Libor a Rudolf HLAVIČKA. *Numerické metody*. Vyd. 2. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2008. ISBN 978-80-214-3752-4.
- [3] CHAWLA, M. Mohan. *Error Estimates for the Clenshaw-Curtis Quadrature* [online]. [cit. 2018-04-18]. Dostupné z: <https://pdfs.semanticscholar.org/43da/f8c2917114075a340955282f8e73458af4c3.pdf>
- [4] ENGELS, Hermann. *Numerical quadrature and cubature*. New York: Academic Press, 1980, 441 s. ISBN 01-223-8850-X
- [5] EMBREE, Mark. *Clenshaw–Curtis quadrature*. [online]. [cit. 2018-04-18]. Dostupné z: <http://www.math.vt.edu/people/embree/math5466/notes.html>
- [6] HILDEBRAND, F. Begnaud. *Introduction to Numerical Analysis*. 2. vyd. United States of America, 1974. ISBN 0-07-028761-9.
- [7] HOROVÁ, Ivana a Jiří ZELINKA. *Numerické metody*. 2., rozš. vyd. Brno: Masarykova univerzita v Brně, 2004. ISBN 80-210-3317-7.
- [8] JOHNSON, Steven G. *Notes on the convergence of trapezoidal-rule quadrature*. [online]. [cit. 2018-04-18]. Dostupné z: <http://math.mit.edu/~stevenj/>
- [9] JUDD, Kenneth L. *Numerical Methods in Economics* Cambridge, Massachusetts, London, England, 1998. ISBN 0-262-10071-1.
- [10] KREJSA, Martin. *Numerická integrace určitého integrálu*. [online]. [cit. 2018-04-29]. Dostupné z: http://fast10.vsb.cz/krejsa/studium/algoritmy_06.pdf
- [11] KUČERA, Radek a Zuzana MORÁVKOVÁ. *Numerická matematika*. Ostrava: Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, 2016. ISBN 978-80-248-3893-9.
- [12] LEVY, D. *Introduction to Numerical Analysis* [online]. [cit. 2018-04-08]. Dostupné z: <http://www2.math.umd.edu/~dlevy/classes/amsc466/lecture-notes/integration-chap.pdf>
- [13] MATHEWS, John H. a Kurtis K. FINK. *Numerical Methods Using Matlab*. Vyd. 4. Upper Saddle River, New Jersey, USA, 2004. ISBN 0-13-065248-2.
- [14] MOŠOVÁ, Vratislava. *Numerické metody*. Olomouc: Univerzita Palackého, 2003. 147 s. ISBN 80-244-0620-9.
- [15] NOVELINKOVÁ, Martina. *Comparison of Clenshaw-Curtis and Gauss Quadrature*. Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta. Praha, 2011. 5 s. ISBN 978-80-7378-184-2

REFERENCE

- [16] O'HARA, H. a Francis J. SMITH. *Error estimation in the Clenshaw-Curtis quadrature formula*. [online]. [cit. 2018-04-18]. Dostupné z: <https://academic.oup.com/comjnl/article/11/2/213/378721>
- [17] QUARTERONI, Alfio, Riccardo SACCO a Fausto SALERI. *Numerical Mathematics*. 2nd ed. New York, NY: Springer, 2006. ISBN 978-038-7227-504.
- [18] RALSTON, Anthony. *Základy numerické matematiky*. 2. české vyd. Praha: Academia, 1978. 635 s.
- [19] REID, Homer. *Clenshaw-Curtis Quadrature* [online]. [cit. 2018-04-18]. Dostupné z: <http://homerreid.dyndns.org/teaching/18.330/Notes/ClenshawCurtis.pdf>
- [20] WEISSTEIN, Eric W. *MathWorld—A Wolfram Web Resource* [online]. [cit. 2018-03-31]. Dostupné z: <http://mathworld.wolfram.com/topics/NumericalIntegration.html>